一种构造总能量守恒格式的新方法*

赵 颖[1,2] 季仲贞[1] 杨宏伟[1] 王 斌[1]
1. 中国科学院大气物理研究所大气数值模拟国家重点实验室，北京 100029；
2. 中国人民解放军理工大学理学院，南京 211101

摘要 依据现代计算方法的基本原则提出了构造总能量守恒格式的一种新方法．利用该方法，通过一类特殊函数构造了形式十分广泛的一大类隐式总能量守恒差分格式(使以往许多守恒格式均成为其特例)；此外该方法也提供了一个判断差分格式是否具有总能量守恒性的具体判据．文中最后给出的算例证实了所构造格式的有效性．

关键词 总能量守恒 差分格式 拟反对称变换 保范变换

大气海洋动力方程是一类比较复杂的非线性偏微分方程，用有限差分法进行数值求解时，常常需要作长时间数值积分，计算量十分巨大，因而在这类问题中的计算稳定性问题是一个十分重要而突出的问题．尽管大气海洋运动是很复杂的，但又是有一定的运动规律的，在不考虑强迫和摩擦的情况下它们具有重要的整体性质，如总能量、总质量、总涡度、总拟能和总角动量守恒等，在文献[1]中曾庆存对此作了详细的论证．正因为大气海洋方程具有这样的物理特性，曾庆存等[2,3]首先从保持系统的总能量守恒性出发用平方守恒格式来解决这类问题，先后发展了瞬时平方守恒和隐式完全平方守恒格式等，并且在大气海洋问题数值模拟中得到很好的应用，取得良好的效果．

通常，大气海洋方程是拟线性的，本文依据一个有关格式构造的定理，给出了构造总能量守恒格式的一条新途径，不仅使以往许多平方守恒格式成为其特例，而且使大气海洋数值模拟可以更灵活地选择适当的格式．

1 总能量守恒系统

实际应用中，许多大气海洋方程是拟线性的，均能写成如下的算子方程形式

$$\frac{\partial F}{\partial t}=\mathscr{L}_{(u)}F(u(x),x),\tag{1}$$

其中$\mathscr{L}$为$\mathbb{C}^{(k)}_{(\Omega)}\to\mathbb{C}(\Omega)$的空间微分算子，$F\in\mathbb{C}^{(k)}_{(\Omega)}$，$\Omega$为定义域，在$\mathbb{C}(\Omega)$上定义内积：

$$(f,g)=\int_\Omega fg\,\mathrm{d}s,\quad \forall f,g\in\Omega.\tag{2}$$

则范数为

$$\|f\|=\sqrt{(f,f)}=\left(\int_\Omega f^2\mathrm{d}s\right)^{\frac{1}{2}}.\tag{3}$$

定义1 若系统(1)的算子$\mathscr{L}_{(u)}$对其任意两个解F，G满足$(\mathscr{L}_{(u)}F,\ G)=-(F,\ \mathscr{L}_{(u)}G)$，则称$\mathscr{L}_{(u)}$为拟反对称算子．

显然，拟反对称算子必是广义反对称算子：$(\mathscr{L}_{(u)}F,\ F)=0$．

定义2 若系统(1)具有如下性质

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{2}\|F\|^2=0,\tag{4}$$

则称(1)为总能量守恒系统．

引理1 若系统(1)的算子$\mathscr{L}_{(u)}$为拟反对称算

2002-03-28 收稿，2002-06-11 收修改稿
* 国家重点基础研究发展规划项目(编号 G1999032801)、中国科学院知识创新工程重要方向(KZCX2208)、国家自然科学基金(批准号：49975020)和国家杰出青年科学基金(批准号：49825109)共同资助
E-mail：zhaoy@mail.iap.ac.cn

子，则称(1)为总能量守恒系统.

大气海洋问题中这种总能量守恒系统是很多的，下面略举一二.

例1 正压无辐散涡度方程(互补形式)

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t}+\frac{1}{2}\left(u\frac{\partial \zeta}{\partial x}+\frac{\partial u\zeta}{\partial x}\right)+\frac{1}{2}\left(v\frac{\partial \zeta}{\partial y}+\frac{\partial v\zeta}{\partial y}\right)=0, \tag{5}$$

方程(5)可改写为如下的算子方程

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t}=\mathscr{L}_{(u,v)}\zeta, \tag{6}$$

其中 $\mathscr{L}_{(u,v)}\zeta=\mathscr{L}_{(u)}\zeta+\mathscr{L}_{(v)}\zeta$，$\mathscr{L}_{(u)}\zeta=\frac{1}{2}\left(u\frac{\partial \zeta}{\partial x}+\frac{\partial u\zeta}{\partial x}\right)$，$\mathscr{L}_{(v)}\zeta=\frac{1}{2}\left(v\frac{\partial \zeta}{\partial y}+\frac{\partial v\zeta}{\partial y}\right)$.

可验证知：在周期边界条件下

$$(\mathscr{L}_{(u,v)}\zeta_1,\zeta_2)=-(\zeta_1,\mathscr{L}_{(u,v)}\zeta_2),$$

即 $\mathscr{L}_{(u,v)}$ 为拟反对称算子.

例2 在忽略摩擦和外源强迫条件下，经 IAP 变换的正压大气浅水方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial U}{\partial t}=-\dfrac{1}{a\cos\theta}\left[\Phi\dfrac{\partial \varphi}{\partial \lambda}+\dfrac{1}{2}\left\{\left(\dfrac{\partial uU}{\partial \lambda}+u\dfrac{\partial U}{\partial \lambda}\right)+\left(\dfrac{\partial v^*U}{\partial \theta}+v^*\dfrac{\partial U}{\partial \theta}\right)\right\}\right]+f^*V\\ \dfrac{\partial V}{\partial t}=-\dfrac{1}{a\cos\theta}\left[\Phi\cos\theta\dfrac{\partial \varphi}{\partial \theta}+\dfrac{1}{2}\left\{\left(\dfrac{\partial uU}{\partial \lambda}+u\dfrac{\partial V}{\partial \lambda}\right)+\left(\dfrac{\partial v^*V}{\partial \theta}+v^*\dfrac{\partial V}{\partial \theta}\right)\right\}\right]-f^*U\\ \dfrac{\partial \varphi}{\partial t}=-\dfrac{1}{a\cos\theta}\left[\dfrac{\partial}{\partial \lambda}(U\Phi)+\dfrac{\partial}{\partial \theta}(V\Phi\cos\theta)\right],\end{cases} \tag{7}$$

其中 $v^*=v\cos\theta$，$\Phi=\sqrt{\varphi}$，$U=\Phi u$，$V=\Phi v$，u，v 分别为纬向风和经向风分量，φ 为位势高度，λ 为经度，θ 为纬度，a 为地球半径，ω 为地转角速度，$f^*=2\omega\sin\theta+u\tan\theta/a$.

方程(7)可改写为如下的算子方程

$$\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial t}=-\mathscr{L}_{(u,v,\Phi)}\boldsymbol{F}, \tag{8}$$

其中 $\boldsymbol{F}=(U,\ V,\ \varphi)^{\mathrm{T}}$，

$$\mathscr{L}_{(u,v,\Phi)}=\begin{bmatrix}\tilde{L} & -f^* & \dfrac{1}{a\cos\theta}\Phi\dfrac{\partial\cdot}{\partial\lambda}\\ f^* & \tilde{L} & \dfrac{1}{a\cos\theta}\Phi\cos\dfrac{\partial\cdot}{\partial\theta}\\ \dfrac{1}{a\cos\theta}\dfrac{\partial\Phi\cdot}{\partial\lambda} & \dfrac{1}{a\cos\theta}\dfrac{\partial\Phi\cos\theta\cdot}{\partial\theta} & 0\end{bmatrix},$$

$$\tilde{L}\equiv\tilde{L}_1+\tilde{L}_2,\ \tilde{L}_1=u\frac{\partial\cdot}{\partial\lambda}+\frac{\partial u\cdot}{\partial\lambda},$$

$$\tilde{L}_2=v^*\frac{\partial\cdot}{\partial\theta}+\frac{\partial v^*\cdot}{\partial\theta}.$$

可验证知：$(\mathscr{L}_{(u,v,\Phi)}\boldsymbol{F}_1,\ \boldsymbol{F}_2)=-(\boldsymbol{F}_1,\ \mathscr{L}_{(u,v,\Phi)}\boldsymbol{F}_2)$，即 $\mathscr{L}_{(u,v,\Phi)}$ 为拟反对称算子.

2 总能量守恒格式的构造

根据文献[4]的思想，系统(1)的任何一个2步差分格式都可以看成从上一时刻到下一时刻的映射，即

$$\boldsymbol{F}^{n+1}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{F}^{n}, \tag{9}$$

其中 $\boldsymbol{F}^n=(F_1^n,\ \cdots,\ F_m^n)$，$F_i^n=F(x_i,\ n\tau)$，$\boldsymbol{F}^n$，$\boldsymbol{F}^{n+1}\in V^m$，$V^m$ 为系统(1)离散化的空间. 显然 $\boldsymbol{A}$ 是此映射的 *Jacobi* 变换

$$\boldsymbol{A}=\frac{\partial \boldsymbol{F}^{n+1}}{\partial \boldsymbol{F}^{n}}, \tag{10}$$

且 $\boldsymbol{A}$ 一般与时间步长 τ 和离散化空间算子 L 均有关.

根据现代数值计算方法的基本原则——问题原型的基本特征在离散后应尽可能地得到保持，因此，针对(1)的格式应该是如下定义的格式.

定义3 若格式(9)具有性质：

$$\|\boldsymbol{F}^{n+1}\|^2=\|\boldsymbol{F}^{n}\|^2,$$

则称(9)为总能量守恒格式.

引理2 若格式(9)的 Jacobi 变换是保范变换，即

$$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{F}^{n+1},\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{F}^{n+1})=(\boldsymbol{F}^{n+1},\ \boldsymbol{F}^{n+1}),$$

则(9)为总能量守恒格式.

引理3 (1) $\mathscr{L}_{(u)}$是拟反对称算子的充分必要条件是$\mathscr{L}_{(u)}{}^{\mathrm{T}}+\mathscr{L}_{(u)}=0$；(2) A 是保范变换的充分必要条件是$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$.

下面先给出一个我们构造总能量守恒格式所依据的定理：

定理1 设 $\psi(x)$是复变量 x 的函数，具有如下性质：

(1) 对 $x=0$ 的某个领域 D，$\psi(x)$对实参数是解析的；

(2) $\psi(x)\psi(-x)=1$，$x\in D$；

(3) $\psi_x(0)\neq 0$.

则$(\psi(\tau\boldsymbol{B}))^{\mathrm{T}}\psi(\tau\boldsymbol{B})=\boldsymbol{I}$，$(\forall\tau)$对充分小的$|\tau|$成立的充分必要条件是 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{B}$.

依据数值计算方法的基本法则，利用引理1，2，3及定理1，我们对系统(1)构造总能量守恒格式可由如下两步完成：

第1步：对系统(1)空间离散化，即对区域 Ω 离散成 m 个点，记 $\boldsymbol{F}=(F_1, F_2, \cdots, F_m)$，$\boldsymbol{U}=(u_1, u_2, \cdots, u_m)$，$F_i=F(x_i)$，$u_i=u(x_i)$使得系统(1)转化为逼近的有限维系统

$$\frac{\partial\boldsymbol{F}}{\partial t}=\boldsymbol{L}_{(U)}\boldsymbol{F} \tag{11}$$

并具有性质$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{2}\|\boldsymbol{F}\|^2=0$，即要求 $\boldsymbol{L}_{(U)}$是拟反对称算子

$$\boldsymbol{L}_{(U)}{}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{L}_{(U)}=0,$$

$\boldsymbol{L}_{(U)}$的构造可用待定系数法[5]求得.

第2步：对系统(11)进行时间离散化，利用定理1，取 $\boldsymbol{A}=\psi(\tau\boldsymbol{L}_{(U)})$，则格式(9)为

$$\boldsymbol{F}^{n+1}=\psi(\tau\boldsymbol{L}_{(U)})\boldsymbol{F}^n \tag{12}$$

是总能量守恒格式；并且我们注意到格式(12)不仅保证了总能量守恒

$$\|\boldsymbol{F}^{n+1}\|^2=\|\boldsymbol{F}^n\|^2,$$

而且还具有如下的守恒量

$$\|\psi(\tau\boldsymbol{L}_{(U)})\boldsymbol{F}^n\|^2=\text{常数}.$$

由如上总能量守恒格式构造的方法，我们可得如下差分格式总能量守恒性的判定依据：

定理2 对总能量守恒系统(1)，若其格式(9)中 $\boldsymbol{F}^{n+1}$到 $\boldsymbol{F}^n$的 Jacobi 变换为

$$\frac{\partial\boldsymbol{F}^{n+1}}{\partial\boldsymbol{F}^n}=\psi(\tau\boldsymbol{L}), \tag{13}$$

其中 $\psi(x)$是满足定理1的函数，L 是系统(1)的拟反对称空间差分算子，则格式(9)是总能量守恒格式.

为此，我们可借助于不同的函数 $\psi(x)$来构造不同的总能量守恒格式(12). 由分析知识我们知道，满足定理(1)条件的函数 $\psi(x)$有许多，如 $\psi(x)=\frac{1+f(x)}{1-f(x)}$($f(x)$是连续的奇函数)、$\psi(x)=\mathrm{e}^x$ 等. 举例如下：

(1) 若取 $\psi(x)=\frac{2+x}{2-x}$，

则格式(12)变为

$$\frac{\boldsymbol{F}^{n+1}-\boldsymbol{F}^n}{\tau}=L\frac{\boldsymbol{F}^{n+1}+\boldsymbol{F}^n}{2}. \tag{14}$$

该格式就是文献[3]中提及的一种著名的平方守恒格式，不难验证它有如下守恒性：

总能量守恒：$\|\boldsymbol{F}^{n+1}\|^2=\|\boldsymbol{F}^n\|^2$；

广义能量守恒：$\|\boldsymbol{F}^n\|^2+\tau^2\|\boldsymbol{F}^n\|^2=$常数；

平均尺度守恒：$\frac{\|L\boldsymbol{F}^n\|}{\|\boldsymbol{F}^n\|}=$常数.

(2) 若取 $\psi(x)=\mathrm{e}^x\approx\frac{P_m(x)}{P_m(-x)}$($\mathrm{e}^x$ 的对称 Pade 逼近)，

其中

$$\begin{aligned}
P_0(x)&=1,\\
P_1(x)&=2+x,\\
P_2(x)&=12+6x+x^2,\\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots,\\
P_m(x)&=2(2m-1)P_{m-1}(x)+x^2P_{m-2}(x).
\end{aligned}$$

则格式(12)变为

$$\boldsymbol{F}^{n+1}=\frac{P_m(\tau L)}{P_m(-\tau L)}\boldsymbol{F}^n,\qquad m=1,2,\cdots, \tag{15}$$

此时格式(15)具有 m 阶精度.

当 $m=1$ 时，格式(15)即为格式(14).

当 $m=2$ 时

$$\frac{F^{n+1}-F^n}{\tau}=L\frac{F^{n+1}+F^n}{2}-\tau L^2\frac{F^{n+1}-F^n}{12},\tag{16}$$

有$(\tau^4+(\Delta x)^2)$阶精度，且具有如下守恒量：

$$\|F^{n+1}\|^2=\|F^n\|^2,$$
$$144\|F^n\|^2+24\tau^2\|F^n\|^2+\tau^4\|L^2F^n\|^2=常数;$$
$$24\|LF^n\|^2+\tau^2\|L^2F^n\|^2=常数;$$
$$24\frac{\|LF^n\|}{\|F^n\|}+\tau^2\frac{\|L^2F^n\|}{\|F^n\|}=常数.$$

此外，如下函数

$$\psi(x)=\frac{1+\tanh\frac{x}{2}}{1-\tanh\frac{x}{2}},\ \psi(x)=\frac{1+\sin x}{1-\sin x},\ \psi(x)=\frac{1+e^x}{1+e^{-x}}\cdots$$均满足定理1中$\psi(x)$的条件.

3 算例

考虑如下变系数微分方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}+2\sin x\dfrac{\partial u}{\partial x}+u\cos x=0, & x\in[0,2\pi],t>0,\\ u(x,0)=\sin x, & x\in[0,2\pi],\end{cases}\tag{17}$$

方程(17)可转化为如下的算子方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\mathscr{L}_x u(x)=0,\tag{18}$$

其中$\mathscr{L}_x u=\sin x\dfrac{\partial u}{\partial x}+\dfrac{\partial(u\sin x)}{\partial x}$；可验证在周期边界条件下，算子$\mathscr{L}_x$是拟反对称算子.

先对空间离散，得拟反对称的离散化空间算子

$$L_x u_i=\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2\Delta x}\sin x_i+\frac{u_{i+1}\sin x_{i+1}-u_{i-1}\sin x_{i-1}}{2\Delta x},$$

取格式(14)有

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\tau}+\frac{\bar u_{i+1}-\bar u_{i-1}}{2\Delta x}\sin x_i+\frac{\bar u_{i+1}\sin x_{i+1}-\bar u_{i-1}\sin x_{i-1}}{2\Delta x}=0\left(\bar u=\frac{u^{n+1}+u^n}{2}\right).\tag{19}$$

取格式(16)有

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\tau}+\frac{\bar u_{i+1}-\bar u_{i-1}}{2\Delta x}\sin x_i+\frac{\bar u_{i+1}\sin x_{i+1}-\bar u_{i-1}\sin x_{i-1}}{2\Delta x}-\tau\left[-(a_{i-1}^2+a_i^2)\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{12}+a_ia_{i+1}\frac{u_{i+2}^{n+1}-u_{i+2}^n}{12}\right]=0,$$
$$a_i=\sin x_i+\sin x_{i+1}.\tag{20}$$

今在$(0,\ 2\pi)$区间内对x离散化，取$\Delta x=0.0316$，$\tau=0.001$，分别用格式(19)和(20)进行比较. 表1列出这两种格式在$t=1500\tau$时的$\|u^{*n+1}-u^n\|$值(u^{*n+1}为该时刻的迭代值)，从中可知用格式(20)可使两时刻的迭代误差为0，而格式(19)却达不到，说明用格式(20)计算不仅其准确性好，而且迭代次数少，从而可以节省计算时间.

表1 两种格式计算结果$\|u^{*n+1}-u^n\|$比较

步数	格式(19)	格式(20)
1	2.236524125008E-004	2.236611275162E-004
2	5.591357744698E-005	4.727453774297E-010
3	5.591274738592E-005	2.063040412778E-015
4	5.591298454319E-005	1.519512968807E-020
5	5.591298454630E-005	1.694178213069E-025
6	5.591298454526E-005	3.496928328280E-030
7	5.591298454526E-005	7.523163845263E-037
8	5.591298454526E-005	0.000000000000E+000
9	5.591298454526E-005	0.000000000000E+000
10	5.591298454526E-005	0.000000000000E+000

参 考 文 献

1 曾庆存. 数值天气预报的数学物理基础. 第一卷, 北京: 科学出版社, 1979

2 曾庆存, 等. 原始方程差分格式的设计. 第二次全国数值天气预报会议论文集. 北京: 科学出版社, 1980. 300～313

3 曾庆存, 等. 发展方程的计算稳定性问题. 计算数学, 1981, 1: 79

4 冯 康, 等. 动力体系的算法. 自然科学进展, 1991, 1(2): 102

5 王 斌. 用待定系数法构造平方守恒型差分格式. 中国科学院研究生院学报, 1988, 5(2): 84