

大气科学中的数值 新方法及其应用

王 斌 季仲贞 著



科学出版社
www.sciencep.com

大气科学中的数值新方法 及其应用

王 斌 季仲贞 著

科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

本书主要介绍求解大气动力学方程的一些新的数值方法及其在大气环流模式动力框架设计方面的应用,重点围绕显式平方守恒差分格式、多守恒差分格式、辛格式、半解析平方守恒格式等适用于大气数值模拟的新方法的构造进行了系统论述。全书共分九章,综合介绍了大气数值模拟作为一种典型高性能科学计算在大气科学研究中的重要作用,通过把大气方程归为一类算子形式的发展方程,阐述了如何设计离散算法的基本方法,针对如何在数值方法中保持原方程的重要物理守恒性质和几何结构做了深入讨论,以具有代表性的球面正压大气浅水波方程为基础,系统研究了一系列格式设计的新理论与新方法,最终成功地应用于新一代大气环流模式动力框架的设计,并在具体的数值检验中取得好的效果,检验了理论方法的实用性。

本书介绍的新数值方法也可用于类似海洋动力学方程等其他发展方程的求解,可供从事大气、海洋数值模拟工作的研究人员参考使用,也可作为相关专业研究生学习计算地球流体力学的参考教材。

图书在版编目(CIP)数据

大气科学中的数值新方法及其应用/王斌,季仲贞 著. —北京:科学出版社,2006

ISBN 7-03-017172-1

I. 大… II. ①王… ②季… III. 大气科学-数值计算 IV. P42

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 052644 号

责任编辑:谢洪源等/责任校对:宋玲玲

责任印制:钱玉芬/封面设计:王 浩

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006年8月第 一 版 开本:787×1092 1/16

2006年8月第一次印刷 印张:13 1/2

印数:1—2 000 字数:308 000

定价:66.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换(科印))

前 言

大气问题的数值模拟以计算量巨大或计算时间很长而著称,在高性能科学计算问题中非常具有代表性。“数字化地球”的提出和信息产业的飞速发展,使高性能科学计算问题得到越来越多的关注和重视,这也对从事大气数值模拟工作的研究人员提出了挑战。在计算准确性要求越来越高以及数值模式中的信息量与日俱增的情况下,解决数值模拟中的时效问题已成为当务之急。这里面包括数值模式的高分辨率、物理过程描述的精细化等。它们不仅涉及很多尚未解决的理论问题,而且与高性能科学计算生息相关,包含巨大的工程问题。此时,物理与数学(尤其是计算科学)的紧密结合显得尤其的重要,忽视任何一面均会对大气科学的发展造成不利的影响。

可持续发展问题和气候、环境变化问题是当今世界各国普遍关注的重大问题,而大气是我们赖以生存的环境的重要组成部分,也是地球流体最重要、最基本的组成部分之一。由于受自然界中许多因子和很复杂的非线性相互作用过程所控制,如果对大气问题不进行高性能数值计算是难以得到正确的认识的,更无法真正解决一些与气候变迁、环境污染等有关的主要实际问题。另外,大气数值计算问题中包含有长时间的数值积分问题,因此必须认真设计计算格式,确保格式的长期计算稳定性、省时性和准确性,才能使计算获得成功。几十年来,经过几代人的不懈努力,已建立一系列有效的计算格式及其相关理论,在大气、海洋和环境等领域得到了成功的应用,使曾庆存先生开辟的新的学科领域——计算地球流体力学得到不断的充实和完善,从而大大促进了大气海洋数值模拟的向前发展。

我们在曾庆存先生的指导下,一直在计算地球流体力学这一新的领域从事科研工作,并取得了一些新的进展。其中一些研究工作曾受益于他学术思想的影响和启发。一个最典型的例子就是辛几何算法在大气科学领域中的推广和应用。那还是在 20 世纪 90 年代初,曾庆存先生就预言,辛几何算法与平方守恒格式存在某种等价关系,因而完全可以推广到大气方程组的求解。而事实正像他所说的那样,在一定条件下这两种算法确实是等价的,不等价的情况也可经适当变量替换相互转化,这是我们做了严格证明的。后来,我们在这一基础上共同发展出辛算子法,从而为这一新算法在大气科学领域中的推广应用架起了桥梁。类似的例子还有不少,但由于篇幅的限制,这里就不一一赘述。总之,本书的很多研究工作都得到了曾先生的精心指点,我们借此机会对他表示由衷的感谢!撰写本书的目的就是要把我们这些年来取得的一些新成果、新进展做一总结和归纳,并从理论上做进一步的完善,使其系统化、条理化,以便广大读者系统阅读、深入了解有关内容,并将我们自己提出的一些新的数值方法及其理论应用到相关领域中去。如果我们的工作能对读者有所帮助,尤其能在各自的应用中发挥好的作用,那么我们撰写此书的目的就达到了。

本书中的一些主要研究成果得到了中国科学技术部国家重点基础研究发展规划(973)项目“高性能科学计算研究”(批准号:2005CB321703)、国家自然科学基金委员会创新群体项目“东亚和西太平洋区域气候变异机理和预测理论”(批准号:40221503)、重点基金项目

“发展模块化的全球耦合气候系统模式”(批准号:40233031)、中国科学院创新团队国际合作伙伴计划项目“气候系统模式研发及应用研究”和百人计划项目“新一代高分辨率大气环流模式的设计及其伴随同化系统的建立”的资助。在此,我们谨对中国科学技术部、国家自然科学基金委员会和中国科学院给予的支持表示衷心的感谢!

本书的第2章、第3章和第6章的部分内容由赵颖协助起草,第9章第9.4节新等面积网格(9.43)~(9.44)~(9.45)的具体实现、第9.7节 Held-Suarez 试验的部分工作和 AMIP 试验的全部工作由万慧完成,一些章节的打字工作由韩加新完成,在此谨向她们的辛勤工作与大力支持表示由衷的感谢!

本书的出版得到中国科学院科学出版基金的资助,也得到科学出版社谢洪源老师及其他同志的支持与关心,在此深表感谢!

谨以此书向大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室成立 20 周年献礼!

中国科学院大气物理研究所 LASG 王 斌 季仲贞

2005 年 11 月 1 日

目 录

前言

第 1 章 大气科学与高性能科学计算	1
1.1 高性能科学计算的重要性	1
1.2 大气数值模拟是一种典型的高性能科学计算问题	3
1.3 计算地球流体力学的过去、现在和未来	4
第 2 章 关于泛函分析的一些预备知识	7
2.1 赋范线性空间	7
2.2 希尔伯特空间	11
2.3 有界线性算子与有界线性泛函	12
2.4 变分原理	17
第 3 章 发展方程与平方守恒差分格式	20
3.1 发展方程及其差分格式	20
3.2 主要稳定性定理	22
3.3 广义反对称算子的构造	24
3.4 定步长显式平方守恒差分格式	32
3.5 变步长显式平方守恒差分格式	36
3.6 协调耗散算子	37
3.7 误差分析	42
3.8 球面正压大气浅水波方程显式能量守恒格式的设计	44
第 4 章 显式平方守恒格式的几何原理	51
4.1 从几何的角度研究显式平方守恒格式的构造	51
4.2 一类新的显式平方守恒格式及其误差分析	53
4.3 一类新的显式 Runge-Kutta 法	55
4.4 显式蛙跳格式的改造和利用	61
4.5 基于预估校正法的显式平方守恒格式	63
4.6 数值检验	64
第 5 章 非守恒情形和多守恒情形	70
5.1 非守恒情形整体性质的分析	70
5.2 原显式平方守恒格式的改造	71
5.3 全球大气动力体系的多守恒特征	75
5.4 方程表示形式的选取	78
5.5 隐式多守恒差分格式的构造	83
5.6 显式多守恒差分格式的构造	86

第 6 章 求解大气动力学方程的辛方法	95
6.1 Hamilton 体系与辛几何、辛算子法	95
6.2 推广辛定义	96
6.3 线性无穷维 Hamilton 系统	100
6.4 Hamilton 体系与平方守恒体系	104
6.5 无穷小辛空间差分算子的构造	106
6.6 线性无限维 Hamilton 系统的求解	111
6.7 辛算子法与大气动力系统	113
6.8 非线性辛算子法	115
6.9 球面正压大气浅水波方程的求解	121
第 7 章 分裂算法的研究	130
7.1 计算时效性问题	130
7.2 快慢过程的相对可分性与算子分裂模型	131
7.3 隐式平方守恒算子分裂算法	139
7.4 显式平方守恒算子分裂算法	141
7.5 其他算子分裂算法	143
7.6 线性与非线性的分裂算法	145
7.7 算子分裂中的区域分裂	148
7.8 数值试验与讨论	150
第 8 章 半解析和半隐式平方守恒格式	154
8.1 基本原理	154
8.2 球面正压大气浅水波方程的半解析平方守恒格式	161
8.3 球面正压大气浅水波方程的半隐式平方守恒格式	166
8.4 基于半解析平方守恒格式的区域分裂算法	167
8.5 数值试验	167
第 9 章 新一代大气环流模式动力框架的设计	171
9.1 几种常用动力框架设计方案	171
9.2 延伸的标准大气层结	173
9.3 基本控制方程及其整体性质	178
9.4 带权等面积坐标	182
9.5 基于显式平方守恒格式的动力框架设计	186
9.6 基于半隐式平方守恒格式的动力框架设计	193
9.7 数值试验	200
主要参考文献	206

第 1 章 大气科学与高性能科学计算

1.1 高性能科学计算的重要性

科学计算的兴起是 20 世纪后半叶最重要的科学技术进步之一,它作为一门迅速发展并获得广泛应用的新兴交叉学科,成为了数学及计算机应用于高科技领域的必不可少的纽带和工具。随着计算机和计算方法的发展,几乎使原有的自然科学都有了相应的计算分支学科,如计算物理、计算化学、计算生物学、计算流体力学等。如今科学计算已和传统的两种科学方法——理论研究和实验方法相并列,成为当今世界科学活动的第三种研究手段(石钟慈,袁亚湘,1998;石钟慈,2000)。在许多情况下,有很多问题无法用传统的理论和实验方法来解决,这或者是理论模型太复杂,或者是其理论难以建立;或者是实验具有危险性,或者是实验费用太昂贵,也或者是根本无法进行实验。这时,科学计算往往成为了解决问题唯一可采用的方法,起着不可替代的作用。

1981 年 1 月 31 日,美国前副总统戈尔(Gore)在加利福尼亚科学中心作了一个题为“数字地球——认识 21 世纪我们这颗星球”的演讲,第一次提出了“数字地球”这一概念。戈尔在演讲中将计算科学列为创建数字地球所必须优先发展的技术之首。他认为,“在计算机出现之前,实验和理论这两种创造知识的方法一直受到限制,实验科学面对的研究现象太困难,不是太大就是太小,不是太快就是太慢”,“另一方面纯理论不能预报如雷雨或飞机上空的空气流动之类的自然现象。正由于此,计算科学突破了实验和理论的局限性”。他的观点再一次说明了科学计算已和理论、实验并列为三大科学方法,而且科学计算是更有效的方法。

科学计算的主要任务是构造求解自然科学各领域中所提出的数学物理问题的计算方法,研究算法的数学、物理特征和复杂性,在计算机上有效地实现算法并进行数值计算试验,分析数值计算的误差,并与相应的理论和实验观测结果作对比和印证,最终应用于科学工程问题的研究。衡量科学计算能力的标准主要体现在计算机的研制水平和实际应用水平两方面。计算机的研制水平可以说是日新月异,日本“地球模拟器”和美国 IBM 蓝色基因等计算机的相继出现,标志着人类已具备研制运算峰值达数十万亿次甚至上百万亿次的高性能计算机的能力。近年来我国计算机的研制水平也取得了令人瞩目的进步,2002 年建成了我国首台万亿次机群系统,并随后相继建成了一批运算峰值在数万亿次到数十万亿次的高性能计算机设备,达到或接近西方发达国家的先进水平。相比之下,计算机实际应用水平则相对落后,一方面,目前计算机的利用效率非常低下,正如美国“加速战略计算创新”(ASCI)计划在 2002 年的总结报告中所指出的那样,在当前由微处理器构成的高性能并行机上,采用传统数据结构和并行算法编制的 ASCI 并行应用软件,一般只能发挥并行机 10% 以下的浮点峰值性能,个别经过特殊优化的程序可发挥到 26%,这无疑成为了阻碍科学计算综合能力发展的一个主要瓶颈。另一方面,科学计算所需要解决的问题越来越复杂、越来越接近实际

模型、越来越细致,面临多学科、多成分、多区域、多尺度、多介质等众多难点,对科学计算的可靠性和预测能力提出了更高的要求。例如,气候的演变是根本不可能在实验室进行试验的,野外观测实验也只局限于某些时刻和某些区域,其整体的长时间综合行为只能通过科学计算来研究,这就是为什么气候系统模式的模拟预测能力备受世界各国政府和科学家关注的主要原因之一。再如自1996年9月联合国大会通过《全面禁止核试验条约》以来,核爆炸试验已被禁止进行,用计算机数值模拟核试验是目前更高层次核竞赛的表现形式,这类科学计算问题的准确性无疑会成为被特别重视的课题。由此可见,计算机的实际应用水平直接关系到人类生存环境、国民经济和国防建设的尖端科技领域,因此如何设计新的数据结构和并行算法,充分发挥并行机的浮点峰值性能,提高计算机的实际应用水平,成为科学计算领域急待解决的重大问题。

以往,人们普遍只看重计算机硬件和软件的作用,不太注意计算方法的重要性,其实并不尽然。计算方法具有与计算机硬件和软件同等的重要性,是联系硬件和软件之间的枢纽。没有好的计算方法,无论有多么好的计算机,还是无法直接应用到科学领域。只有把高性能计算机和高性能计算方法有效地结合起来,才能发挥强有力的作用。举例来说,从20世纪50年代初计算机的出现到20世纪90年代中期,计算机的运算速度从每秒数千次提高到每秒几千亿次,大致提高了1亿倍。而同一时期,求解科学工程计算问题中大量出现的椭圆型偏微分方程的算法的运算速度却提高了1万亿倍,显然,只靠计算机的更新是不可能实现的。以上例子已充分说明了这样一个事实,在科学技术飞速发展的今天,设计经济有效的计算方法,对提高科学计算能力是何等的重要!美国总统信息技术顾问委员会(PITAC)2004年的报告曾明确指出,“对数学和计算机科学算法的持续开发和改进是未来高端体系结构成功的关键”,“算法的改进对性能的贡献,往往超过处理器速度的提高”。因此,在加强硬件研究的同时,必须把算法研究,进而软件开发研究都同时跟上去,否则很难发挥硬件的优势作用。

科学计算包括“大规模”和“高性能”两方面。“大规模”有两层含义:一方面表示所要进行的科学计算规模非常巨大,另一方面则是如何利用计算机实现这样的计算,并强调在进行计算时具备使用数百上千或成千上万处理器的能力。因此,大规模科学计算注重的是解决“量”的问题。而高性能科学计算则是在“大规模”的基础上,强调计算的准确性及其有效实现技术,尤其要求计算具有最大限度地发挥计算机使用效率的能力,注重解决“质”的问题。目前,高性能科学计算的发展水平已经成为衡量一个国家综合国力的重要标志。

美国早在1997年就启动了ASCI的重大计划,紧接着于1999年由美国PITAC推出了“21世纪的信息技术:对美国未来的大胆投资”(ITT)的计划,然后在继续执行上述两项计划的同时,又于2001年9月推出了旨在有效利用万亿次高性能计算机推进科学基础研究的“高级计算推动科学发现”(SciDAC)的计划,该计划涉及美国能源部科学办公室资助的包括基础能量科学、生物与环境研究、聚变能量科学、高能和核物理等各个领域,该计划称“这些领域中的某些重大科学问题只能通过科学计算的进步来解决”。2004年,美国的PITAC报告又新发布了“高端计算复兴计划研究项目”,针对日本和欧洲等挑战,开始拟定一系列计划,巩固其高性能计算的领先地位。可见美国对高性能计算的高度重视。

我国对高性能科学计算研究也一直高度重视,早在“八五”期间就开始立项支持攀登计

划项目“大规模科学与工程计算的方法和理论”,在“九五”期间继续支持攀登计划预选项目“大规模科学与工程计算”。“十五”期间又实施了国家重点基础研究发展规划(973)项目“大规模科学计算研究”。“十一五”又新批准了 973 项目“高性能科学计算研究”。另外,还执行了其他一些与科学计算密切相关的重大项目和计划。在这些项目的持续资助下,我国的高性能科学计算得到很大的发展,目前已成为国内的优势学科之一,并在能源、材料、大气环境、国防等多个领域得到成功应用。

随着科学研究的不断深入以及新的现象和问题的不断涌现,自然科学各领域对高性能科学计算提出了越来越高的要求,因此,长期持久地深入开展高性能科学计算的研究对于提高人类认识世界的能力、有效保护人类生存环境、促进社会经济的发展将起着至关重要的作用。

1.2 大气数值模拟是一种典型的高性能科学计算问题

大气圈是一个复杂多变的多尺度非线性系统,它的发展和演变受诸多因素如动力、热力和化学等因素的影响。综合考虑这些影响因素,我们可以把大气体系描述成一组非常复杂的非线性非齐次偏微分方程组。到目前为止,世界上还没有人能够从数学上求出这组方程的精确解。因此,用数值的方法来求解大气方程组从而研究大气运动规律成为目前大气科学领域最主要的研究手段之一,这就是我们通常所说的大气数值模拟(季仲贞等,1994)。由于大气运动的多尺度特征,根据其不同的空间尺度,大气数值模拟可分为中尺度数值模拟、大气环流模拟等。而从多时间尺度的角度,它又分为短时、短期、中期和长期数值天气预报以及跨季度、跨年度气候预测和长时间(10 年、100 年甚至 1000 年)气候数值模拟等。就拿气候数值模拟来说,它在过去的几十年中采用的主要是一种“物理-动力方法”。这就是根据基本的物理定律(如牛顿运动定律和热力学定律等)建立起来的数学物理方程组去确定“气候系统”的各个部分(如大气、海洋、冰雪、植被及陆地表面等)的性状,由此构成气候的数学物理模型,然后用数值的方法求解,并具体在计算机上建成数值模式,也就是人们所说的气候模式。气候模式是研究当前气候的特征和行为、了解其过去演变、预测其未来变异的不可替代的最具潜力的工具之一。气候模式不仅可用于模拟当代气候,而且可用于模拟某些“外部”条件(如地球大气所接收的太阳辐射等)和内部参数(如大气中的 CO_2 浓度等)的变化所引起的气候变化。当然,任何气候模式又都是实际气候系统的某种程度的近似,在利用它们模拟气候的同时,还必须不断地检验它们本身的可靠程度,并不断地加以改进。

为了进行气候数值模拟,往往需要将气候模式积分几十年、几百年乃至上千年。为了保证模式在数值模拟过程中的计算稳定性和准确性,所能选取的时间步长是较小的。针对不同的问题和不同的分辨率,其时间步长可能是几分钟,也可能是半小时,至多取到 1h,因此其计算步数一般是较多的。此外,为了保证计算的精度,模式的空间分辨率又不能太低,针对不同的研究对象,可取的空间格距可能是几公里、几十公里至多几百公里,因此其计算量是十分巨大的。例如我们后面将要介绍的 26 层 128×60 全球大气环流模式 GAMIL(为英文全称 Grid-point Atmospheric Model of IAP LASG 的缩写),在 IBM P690 上运行,用 8 个处理器并行运行一天只能积分约 4 年的时间,那么,对于需要连续数值积分几百年甚至上千

年的气候模拟问题来说,所需的 CPU 时间高达到连续数月到连续一年以上,可见其计算量之巨大。如果再把模式的垂直分层和水平分辨率增加 1 倍,其计算量将增加一个数量级以上。因此,除了飞速发展计算机技术以外,开展经济有效的数值方法研究也将是为我们排忧解难的一种不可忽视的途径。近 10 年来,我国计算机技术取得了长足的发展,其计算能力已进入世界先进水平的行列。如何充分发挥现有计算机系统的效率,提高我国包括气候数值模拟在内的高性能科学计算水平,是摆在我们面前的挑战性问题。高性能数值方法的研究就是解决上述问题的一个重要途径,具有十分重要的现实意义。以上的事例已清楚地告诉我们,以气候数值模拟为代表的各种数值模拟问题,是典型的超大规模高性能科学计算问题,它不仅要求越来越大、越来越快的计算机,而且更要求越来越有效,越来越省时的数值方法,包括高效并行计算方案。计算机与数值方法的结合可以说是电脑与人脑的结合,两种不同智慧的碰撞,必将产生高效率的火花。

1.3 计算地球流体力学的过去、现在和未来

大气和海洋可以当作连续的流体介质,它们有很多共同的流体动力学特征,对它们其中一个的研究通常可以丰富我们对另一个的理解,基础的动力学概念都能够应用于它们。这可以说是研究大气海洋最佳的起点。基于上述这些理解,地球流体力学从此诞生了。Pedlosky (1987) 曾给出过一个简洁而又严格的定义:地球流体力学是这样一门学科,它所关心的是对大气海洋的理解至关重要的基本动力学概念,它一般地研究地球上所有自然发生的流体运动。随着计算机技术的飞速发展和不断更新,地球流体力学现在已得到很大的发展和完善,它不仅研究大气海洋的运动,而且也研究气候、环境、生态以及人口、资源等问题。

地球流体运动一般可用一组偏微分方程来描述,包括作为因变量的流场变量和作为自变量的时空坐标。这就是所谓的地球流体力学方程。然而,地球流体力学方程往往是非常复杂的和非线性的,根本不知道是否有通解存在。为了获得对地球流体运动物理特性的了解,非常必要去发展数值方法以求得近似解。计算地球流体力学就是专门研究求解地球流体力学方程的数值方法及其相关理论(季仲贞等,1999,2000)。这是近 20 年里发展起来的地球流体力学的一门分支学科。从 20 世纪 60 年代开始,气象学家们就开始比较系统地对求解大气方程的数值方法理论进行了研究。以曾庆存为首的我国学者率先提出了完全能量守恒差分格式(曾庆存等,1980a,b,1987;季仲贞等,1982a;季仲贞,1982)、沿轨道积分的差分格式(后来被称之为迎风差分格式、拉格朗日格式以及以此为基础发展起来的半拉格朗日格式)(曾庆存,1961;王宗皓,1981)、标准大气扣除方法等,并在具体的大气海洋数值模拟中取得成功应用(曾庆存等,1980a,b,1987,1988,1989;张学洪等,1988),为后来计算地球流体力学的诞生奠定了基础。与此同时,国外的气象学家们也对这方面的研究开始予以重视和关注,并且几乎同步地开展了大气数值求解方法的研究,发展了一系列瞬时平方守恒差分格式(Arakawa, 1966; Lilly, 1965; Shuman, 1962; Strang et al., 1973)。尽管这些格式后来被季仲贞(1981,1986a,1986b)证明存在非线性计算不稳定性,但它们在计算地球流体力学领域仍不失为奠基性的工作。另外,曾庆存等(1981a,1981b)专门研究了发展方程的非线性计算稳定性问题。正是基于上述这些早期研究工作的积累,曾庆存于 80 年代首次正式提出

了计算地球流体力学的概念,开辟了这一新的学科领域。迄今为止,这一领域已得到了很大的发展,取得了很多新进展和成果。譬如说,显式平方守恒差分格式(王斌,1988;Wang et al., 1990, 1994, 1995a, 1996; Ji et al., 1991)、经济算法(Wang et al., 1993a, 1993b, 1995b, 1995c; Ji et al., 1995)和辛算子法(Wang et al., 1997; 王斌等,2001)等就是三个有代表性的新成果。

回顾大气数值模拟研究的发展过程,我们清楚地看到,如果仅依靠计算机技术的发展与更新来促进我国大气数值模拟研究的发展,我们目前根本没有任何可能在这一领域去赶超世界先进水平。在过去的几十年中,以曾庆存为首的老一辈科学家正因为充分发挥了自己在数值方法研究方面的优势,才弥补了计算条件不如发达国家的缺陷,不仅创立了计算地球流体力学这一新的学科分支,而且取得了一批重要的研究成果,尤其这些成果是具有中国特色的,并在大气环流数值模拟、大洋环流数值模拟、海陆气耦合数值模拟、跨季度气候预测、近岸海流数值模拟、河流三角洲发育数值模拟等具体应用中取得了成功的应用。在计算条件远远落后于西方国家的情况下,中国科学院大气物理研究所大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室(LASG)基于计算地球流体力学理论和方法自行设计的大气环流模式成为发展中国家唯一有能力参加1995年的国际大气模式比较计划(AMIP)的模式,并取得了好成绩。后来,LASG设计的耦合气候系统模式再一次作为发展中国家唯一的模式参加了国际耦合模式比较计划(CMIP)的第一和第二阶段的研究,其模式性能良好。值得一提的是,我们利用自行设计的海气耦合模式研究了增强的温室效应对全球气候变化的影响,其结果分别被1992、1996年和2001年政府间气候变化委员会(IPCC)的第一、二、三次评估报告所引用。2005年,我们又完成了IPCC第四次评估报告所要求的模拟实验,并提交了我们的结果。由此可见,由于我们有着在计算地球流体力学领域的优势和特色,在计算机总体计算能力一直不如发达国家的情况下,在气候模式设计与气候数值模拟方面取得了有着与国际水平可比的研究成果。

在肯定成绩的同时,还要看到我们的不足。我们的模式在整体性能上与国际先进水平还有很大的距离,模式的分辨率仍然还很低,物理过程以及其他过程(如化学过程、生态过程等)的考虑还很不精细,尤其这方面严重缺乏自己的工作,对所建立模式的评估与理解不如发达国家深入,还存在很多科学问题等待我们去解决。我们需要围绕这些问题开展深入的研究,最终解决这些问题。其中,计算地球流体力学新方法、新理论的研究将继续扮演着不可忽视的角色。综合考虑我们的优势和薄弱环节,我们认为以下各方面应作为今后计算地球流体力学研究的重点方向:

- 1) 寻找有效求解静力平衡方程中的重力波方程和非静力平衡方程中的声波方程的有限差分格式,缓解或消除重力波和声波分别给静力和非静力平衡模式的计算稳定性带来的严重影响;

- 2) 继续探索地形的处理方案,使得模式地形的描述更加接近实际,尤其能够在水平耗散方案中充分考虑地形坡度的作用;

- 3) 构造求解大气方程组的时间交替半隐式经济格式,进一步节省模式动力框架的计算时间;

- 4) 深入研究适合求解大气方程组的局地能量守恒差分格式和多辛差分格式,不断提高

模式动力框架的精度和性能;

5) 针对大气方程组开展具有并行秉性的差分格式的研究,充分利用分布式计算机系统的资源,实现大气环流模式的高性能计算;

6) 针对目前区域气候模式的时变侧边界条件,仔细分析其物理上的合理性和数学上的适定性,以此为基础探索与模式方程协调的侧边界条件,改善区域气候模式的长时间模拟性能和相对独立性;

7) 针对目前耦合气候模式中海-气交界面和陆-气交界面常用的边界条件(即耦合方案),深入研究其物理上的合理性和数学上的适定性,发现其中存在的突出问题,寻找解决的办法,并提出新的方案。

通过以上工作,可使大气海洋和环境数值模拟工作在计算稳定性、计算准确性和计算省时性方面向前迈进一大步,可以找到更有效地服务于减灾防灾的办法和控制或减少环境污染的有效措施,为整个社会协调的可持续发展做出积极的贡献。

第2章 关于泛函分析的一些预备知识

2.1 赋范线性空间

为了方便后面的讨论,我们先预习一下本书中要用到的一些基本泛函分析知识。我们以夏道行等(1983)撰写的《实变函数论与泛函分析》(下)为基础,将尽可能用比较通俗的语言来介绍这些基本的数学知识,以便于不同学科领域的读者阅读。

我们首先要介绍的概念是“线性空间”。这一概念相对比较抽象,它不同于我们实际生活中“空间”的概念。为了把这一概念解释清楚,我们必须引入“集合”的概念。相对于“线性空间”来说,大家对“集合”可能更加容易理解。譬如说,所有实数归在一起,就形成一个集合,称为实数集;而所有无理数归在一起则组成无理数集。再譬如,在区间 $[0, 1]$ 上所有连续可微的函数组成一个集合。在现实生活中,也有很多关于集合的例子,如人们通常说的“青年人”就是一个集合,由18岁以上35岁以下的人组成。类似的例子很多,这里就不一一列举。对于一个给定的集合,如果该集合中的任意两个元素的和以及它的任意一个元素与实数的数积仍然属于这个集合,则这个集合就被称之为一个线性空间。可以看到,线性空间不同于集合的地方是它涉及到了两个运算,即加法和数乘运算。它们可以是通常意义下的加法和数乘,也可以是自己定义的加法和数乘,但它们必须满足以下八条性质:①加法交换率,即集合中的两个元素相加,其和不受两个元素的先后次序影响;②加法结合率,即集合中的一个元素与另两个元素的和相加应等于这个元素与那两个元素中的第一元素之和加余下的元素;③零元素性质,即集合中存在“零元素”,使得集合中的任意一个元素与零元素之和仍然等于这个元素;④逆元素性质,即集合中任意一个元素存在“逆元素”,使得它们之和为零元素;⑤数乘结合律,即集合中任意一个元素与一个实数的积再与另一个实数数乘应等于该元素与这两个实数的积数乘;⑥集合中任意一个元素与实数1相乘仍等于这个元素;⑦第一分配律,即集合中任意一个元素与两个实数的和相乘应等于这个元素分别与那两个实数的积相加;⑧第二分配律,即集合中任意两个元素的和与一个实数相乘应等于这两个元素分别与该实数的积相加。显然,线性空间的定义要比集合严格得多。就拿上面举出的集合的例子,可以验证,实数集配备通常意义下的加法和乘法运算即构成一个线性空间。同样可验证,连续可微的函数集也构成一个线性空间。但无理数集不能构成一个线性空间,“青年人”当然更不可能构成线性空间。有兴趣的读者可以再多举一些例子来加深对集合和线性空间这两个概念的理解。

下面我们介绍“子集”和“子空间”的概念。上面提到了实数集和无理数集,我们可以看到这两个集合有这样一种关系:无理数集中的任意一个元素都是实数集中的元素(因为无理数都是实数),但实数集中的元素不一定是无理数集中的元素(因为实数中还包含了有理数)。显然,实数集是一个比无理数集大且把无理数集包含在内的集合。这时,我们就称无理数集为实数集的一个“子集”。同样,有理数集、整数集以及实数集自身都是实数集的子

集。由于无理数集或有理数集确实只是实数集的一部分而不是实数集的全部,因此,我们也称无理数集或有理数集是实数集的“真子集”,而实数集自身则不是实数集的“真子集”。通过上面的例子,“子集”和“真子集”的概念应该已经建立起来了,只需读者将其推广到一般意义下就行了。有了子集和真子集的概念,我们就容易给出“子空间”和“真子空间”的定义。假设一个集合 X 是集合 Y 的子集。若在 X 和 Y 中定义相同意义的加法和数乘而都成为线性空间,则称线性空间 X 是线性空间 Y 的子空间,若 X 是 Y 的真子集,则称 X 是 Y 的真子空间。子空间和真子空间分别采用记号 $X \subseteq Y$ 和 $X \subset Y$,与子集和真子集的表示一致。

上面通过一些简单的例子分别给出了集合、子集、真子集、线性空间、子空间和真子空间的概念。为了加深印象,下面再举一些例子。例如, n 维向量 $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 的全体组成集合 V_n ,在 V_n 中引入熟知的如下关于向量的加法和数乘运算:

$$\text{加法: } x + y = \{x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots, x_n + y_n\}$$

$$\text{数乘: } \alpha x = \{\alpha x_1, \alpha x_2, \dots, \alpha x_n\}$$

式中 $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 和 $y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ 为集合 V_n 的任意两个元素, α 为任意一实数。很容易验证这两个运算的八条性质,此时“零元”即为零向量 $\theta = \{0, 0, \dots, 0\}$, x 的“逆元”即为负向量 $-x = \{-x_1, -x_2, \dots, -x_n\}$ 。因此, V_n 是线性空间,称它为 n 维向量空间,仍记作 V_n 。

我们知道二维向量可以看作特殊的三维向量。因此二维向量空间是三维向量空间的子空间,而且是真子空间。

有了线性空间的概念后,大家一定会问,有什么办法来度量线性空间中的元素呢?这正是我们下面要谈的问题。在实际生活中,我们采用长短、大小、多少和轻重等概念来度量现实世界中的事物。而对于一个抽象的线性空间,数学家们也找到了一种科学方法来度量它的元素,这就是范数。设 X 是一个线性空间。若对于 X 中的任一元素 x 都有一个被记作 $\|x\|$ 的实数与它对应,且满足下列三个条件:① $\|x\| \geq 0$,且 $\|x\| = 0$ 的充分必要条件是 $x = 0$ (零元素);② 对任意实数 α , $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$;③ 对 X 中的任意两个元素 x, y , $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (三角形不等式);则称 $\|x\|$ 为元素 x 的范数。定义了范数的线性空间称为赋范线性空间或简称赋范空间。

根据上述范数的定义,我们定义线性空间 X 中任意两个元素 x, y 之间的距离 $\rho(x, y) = \|x - y\|$ 。因此,赋范线性空间是距离空间。

很显然,在 n 维向量空间 V_n 中可配置范数 $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$,式中 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 为 V_n 中的任意一个元素。因此, V_n 是一个赋范线性空间。

下面介绍依范数收敛的概念,进而引入“完备”的定义。设 X 是配置了范数 $\|\cdot\|$ 的赋范线性空间, $\{x_n\}$ 是 X 中的一个点列。若在 X 中存在 x ,使得 $\rho(x_n, x) = \|x_n - x\| \rightarrow 0 (n \rightarrow \infty)$,则称点列 $\{x_n\}$ 依范数 $\|\cdot\|$ 在 X 中收敛到 x 。若点列 $\{x_n\}$ 在距离 ρ 意义下是基本序列,则称点列 $\{x_n\}$ 是依范数 $\|\cdot\|$ 的基本序列。

有了依范数收敛的概念,就可以定义“完备”的线性空间了。设 X 是配备了范数 $\|\cdot\|$ 的赋范线性空间。若 X 中的任何基本序列都是收敛序列,则称 X 是完备的赋范线性空间,又称为 Banach(巴拿赫)空间。

不完备的赋范线性空间 X ,可以依范数(实际上是依由范数派生的距离)进行完备化,生

成完备化赋范线性空间,记作 X^* 。

前面提到的线性空间 V_n 就是 Banach 空间。

在一个线性空间中也可同时定义几个范数。设 X 是线性空间, $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$ 是定义在其上的两个范数。若存在正的常数 C 使得 $\|x_1\| < C\|x\|_2, \forall x \in X$ 成立,则称范数 $\|\cdot\|_2$ 强于范数 $\|\cdot\|_1$ 。若存在两个正的常数 C_1, C_2 使得 $C_1\|x\|_1 < \|x\|_2 < C_2\|x\|_1, \forall x \in X$ 成立,则称范数 $\|\cdot\|_2$ 和范数 $\|\cdot\|_1$ 等价。显然,若范数等价,则由此派生的距离、极限、收敛以及由收敛定义的其他概念(例如完备性)都是等价的。

例如,设 $\{x_n\}$ 在范数 $\|\cdot\|_1$ 意义下收敛到 x ,则 $\{x_n\}$ 在范数 $\|\cdot\|_2$ 意义下也收敛到 x 。事实上,由于 $\|x_n - x\|_2 < C_2\|x_n - x\|_1$,则当 $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x_n - x\|_1 \rightarrow 0$,必有 $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x_n - x\|_2 \rightarrow 0$,反之亦然。

在 V_n 空间中,也可定义元素 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 的范数为 $\|x\|_1 = \max_{x \in V_n} \{|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|\}$ 。注意到原先的范数为 $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$,显然有 $\frac{1}{n} \cdot \|x\| < \|x\|_1 < 1 \cdot \|x\| (\forall x \in V_n)$,因此两种范数是等价的。

下面介绍两个最常用的线性空间。第一个就是连续函数空间。设 $C(\Omega)$ 是由 Ω 上所有的连续函数组成的集合,对它引进如下线性运算:

加法: $(f+g)(x) = f(x) + g(x) (\forall f(x), g(x) \in C(\Omega), x \in \Omega)$

数乘: $(\alpha f)(x) = \alpha \cdot f(x) (\forall f(x) \in C(\Omega), \alpha \in R, x \in \Omega)$

式中 R 为实数集。

首先,我们要讨论 $f+g$ 和 αf 是否仍为 $C(\Omega)$ 的元素。为此要注意到 $C(\Omega)$ 中元素 f 的性质——连续性,即对于任何 $f(x) \in C(\Omega)$ 和任何 $x_0 \in \Omega$,都有: $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = f(x_0)$ 。由于极限运算的性质,显然就有 $\lim_{x \rightarrow x_0} (f+g)(x) = \lim_{x \rightarrow x_0} (f(x) + g(x)) = \lim_{x \rightarrow x_0} f(x) + \lim_{x \rightarrow x_0} g(x) = f(x_0) + g(x_0) = (f+g)(x_0)$ 以及 $\lim_{x \rightarrow x_0} (\alpha f)(x) = \lim_{x \rightarrow x_0} \alpha \cdot f(x) = \alpha \cdot \lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = \alpha \cdot f(x_0) = (\alpha f)(x_0)$ 。因此, $(f+g)(x) \in C(\Omega), (\alpha f)(x) \in C(\Omega)$ 。

可以验证上述加法和数乘的八条性质,其中“零元”规定为函数 $f(x) \equiv 0$,“逆元”规定为负函数 $(-f)(x) = -f(x)$ 。为了讨论简洁,下面仅验证第七条来说明验证的方法,其他类同。设 $f \in C(\Omega), \alpha, \beta \in R, \forall x \in \Omega$,则有 $((\alpha+\beta)f)(x) = (\alpha+\beta) \cdot f(x) = \alpha f(x) + \beta f(x) = (\alpha f)(x) + (\beta f)(x) = (\alpha f + \beta f)(x)$,因此有 $(\alpha+\beta)f = \alpha f + \beta f$ 。于是获得结论: $C(\Omega)$ 是线性空间。

在 $C(\Omega)$ 中,若 Ω 为有界闭集时,可配置范数 $\|f(x)\| = \max_{x \in \Omega} |f(x)|, \forall f \in C(\Omega)$ 。容易验证范数三条件是满足的。事实上

- 1) $\|f(x)\| \geq 0$, 且 $\|f(x)\| = 0$ 等价于 $f(x) \equiv 0, \forall x \in \Omega$;
- 2) $\|\alpha f\| = \max_{x \in \Omega} |\alpha \cdot f(x)| = |\alpha| \cdot \max_{x \in \Omega} |f(x)| = |\alpha| \cdot \|f\|, \forall f \in C(\Omega), \forall \alpha \in R$;
- 3) $\|f+g\| = \max_{x \in \Omega} |f(x) + g(x)| \leq \max_{x \in \Omega} |f(x)| + \max_{x \in \Omega} |g(x)| = \|f\| + \|g\|, \forall f, g \in C(\Omega)$ 。

因此 $C(\Omega)$ 是赋范线性空间。

由范数 $\|f\|$ 派生出的距离 $\rho(f, g) = \|f - g\| = \max_{x \in \Omega} |f(x) - g(x)|, \forall f, g \in C(\Omega)$ 。

必须注意的是,当 Ω 是有界闭集时, $C(\Omega)$ 是赋范线性空间,并且是个完备的赋范线性空间。

假若 Ω 不是有界闭集合,那么 $C(\Omega)$ 仍是线性空间,但上面定义的范数不一定存在,因此就不一定能称为赋范线性空间。

我们把在 Ω 上具有 m 阶连续(偏)导数的函数全体组成的集合称为 m 阶连续可微函数集合,记作 $C^m(\Omega)$,其中 $m > 0$,是整数。特别规定 $m = 0$ 时 $C^m(\Omega) = C^0(\Omega) \equiv C(\Omega)$ 。

由于在 $C^m(\Omega)$ 中可引进与 $C(\Omega)$ 中相同的线性运算,则同样可证明 $C^m(\Omega)$ 都是线性空间,称为 m 阶连续可微函数空间。显然一般地有

$$C^m(\Omega) \subset C^{m-1}(\Omega) \subset \cdots \subset C^1(\Omega) \subset C^0(\Omega) \equiv C(\Omega)$$

即左边的线性空间都是右边线性空间的真子空间。

当 Ω 是有界闭集时,在所有 $C^m(\Omega)$ 中都可引进范数 $\|f\|_0 = \max_{x \in \Omega} |f(x)|, \forall f \in C^m(\Omega)$ 及范数 $\|f\|_m = \max_{x \in \Omega} \{|f(x)|, |\partial^k f(x)|, k = 1, 2, \cdots, m\}, \forall f \in C^m(\Omega)$,式中 $\partial^k f(x)$ 表示 $f(x)$ 的第 k 阶(偏)导数。很显然有 $\|f\|_0 \leq \|f\|_m$,这说明 $\|\cdot\|_m$ 强于 $\|\cdot\|_0$ 。

我们要介绍的另一个常用线性空间是可积函数空间。在 $[a, b]$ 上定义的函数 $f(x)$,若 $|f(x)|^p$ 在 $[a, b]$ 上是可积的,则称 $f(x)$ 为 p 次可积函数,其中 $p \geq 1$ 。 p 次可积函数的全体组成集合 $L^p[a, b]$ 。可以验证 $L^p[a, b]$ 是一个线性空间。事实上,由积分性质,有 $\int_a^b |\alpha f(x)|^p dx = |\alpha|^p \int_a^b |f(x)|^p dx < +\infty (\forall f \in L^p[a, b], \alpha \in R)$,所以 $\alpha f(x) \in L^p[a, b]$ 。另因有不等式 $(|\alpha| + |\beta|)^p \leq 2^p (|\alpha|^p + |\beta|^p) (p \geq 1)$,则 $\int_a^b |f(x) + g(x)|^p dx \leq \int_a^b (|f(x)| + |g(x)|)^p dx \leq 2^p \int_a^b (|f(x)|^p + |g(x)|^p) dx \leq 2^p (\int_a^b |f(x)|^p dx + \int_a^b |g(x)|^p dx) < +\infty (\forall f, g \in L^p[a, b])$,即 $f(x) + g(x) \in L^p[a, b]$ 。

我们还可以验证 $L^p[a, b]$ 是赋范空间。 $\forall u(x) \in L^p[a, b], p \geq 1$,可以定义范数为 $\|u(x)\| = \left(\int_a^b |u(x)|^p dx\right)^{\frac{1}{p}}$ 。容易验证范数的三种条件:

1) 显然有 $\|u(x)\| \geq 0$ 。由积分性质显然有 $\|u(x)\| = 0$ 等价于 $\int_a^b |u(x)|^p dx = 0$,又等价于 $u(x)$ 几乎处处为零,第一种条件满足;

2) 又 $\|au(x)\| = \left(\int_a^b |au(x)|^p dx\right)^{\frac{1}{p}} = (|a|^p \int_a^b |u(x)|^p dx)^{\frac{1}{p}} = |a| \cdot \|u(x)\|$,第二种条件满足;

3) 第三种条件应满足: $\left(\int_a^b |u(x) + v(x)|^p dx\right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(\int_a^b |u(x)|^p dx\right)^{\frac{1}{p}} + \left(\int_a^b |v(x)|^p dx\right)^{\frac{1}{p}}$,这就是所谓的闵可夫斯基(Minkowski)不等式。要证明闵可夫斯基不等