

协调多时次差分格式及其稳定性*

张立新^{1,2)} 钱维宏²⁾ 高新全¹⁾ 丑纪范¹⁾

¹⁾ 兰州大学大气科学学院, 兰州 730000)

²⁾ 北京大学物理学院, 北京 100871)

(2004 年 10 月 29 日收到, 2004 年 12 月 16 日收到修改稿)

提出对求解常微分方程的各种数值算法, 可以建立与之相协调的多时次差分格式. 并从数学上给出了一个其计算稳定性的充分条件, 同时提出了一种改进的最小二乘法来拟合自忆系数, 以期在实际计算过程中既可以改善计算效果, 同时也可使其稳定性得以保障.

关键词: 协调多时次差分格式, 计算稳定性, 最小二乘法

PACC: 9260X

1. 引言

自顾震潮^[1,2]提出利用历史资料来改进数值天气预报以来, 历史资料的使用问题越来越引起人们的重视. Chou^[3]从泛函极值的概念导出了多时刻预报模式, 从而使发展和应用各种不同的多时刻模式来做数值预报成为一个重要的研究领域. 我国学者已经从不同方面作了大量工作, 特别是 Cao^[4]建立的包含多个时刻观测资料的大气自忆性方程, 能将现有的多时刻数值预报模式统一在自忆性方程的框架之内, 是很有意义的. 此后, Feng^[5-7]和谷湘潜^[8,9]等从不同的角度提出各种针对多时刻模式的计算格式, 从理论和实践上做了很多有益的研究, 丰富了多时刻预报理论.

然而正如 Feng^[10]指出的那样, 计算稳定性一直困扰着多时刻模式的进一步深入研究和应用, 稳定性成为多时刻模式理论研究和实际应用的一个瓶颈问题. Feng^[6,11]和谷^[9]针对这一问题作了初步探讨, Feng 以线性平流方程为例, 指出多时刻计算格式的稳定性非常复杂, 只有对时变的自忆系数加以约束, 才有可能使计算稳定, 谷则以描述大气运动的准地转正压模式为例, 说明动力核的选取对计算时效影响很大. 可是另一方面, 现有实际应用中的各种数值

预报模式都采用单时次的差分格式, 而且与其对应的稳定性问题不论从理论上还是从应用上都是相当完善的, 那么是否可以在已有的单时次数值差分格式的基础上架构与其相协调的多时次差分格式, 既能使原有的稳定性得以一定程度的保留, 却仍可使用多个时刻的观测资料, 甚至可以保留一些原始模式的其他数学物理性质呢? 本文正是在这方面进行了初步探讨, 以常微分方程为例, 提出可以构造与原始模式差分格式相协调的多时次差分格式, 同时结合改进的最小二乘法来拟合自忆系数, 以期提高其计算稳定性与计算效果.

本文首先给出了协调多时次差分格式的构造方法, 其次从数学上给出了一个稳定性的充分条件, 最后阐述了最小二乘法的改进技巧.

2. 协调多时次差分格式的构造

对于求解常微分方程的各种算法, 可以统一写为

$$\begin{aligned} & \alpha_k u_{m+k} + \alpha_{k-1} u_{m+k-1} + \dots + \alpha_0 u_m \\ & = h\Phi(t_m, u_{m+k}, u_{m+k-1}, \dots, u_m; h, f), \\ & 0 \leq m \leq M - k, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $\alpha_j (j = 0, 1, \dots, k)$ 为不依赖于 m 的实常数, $\alpha_k \neq 0$, k 为一固定的正整数, h 为积分步长, u_0, u_1, \dots

* 国家重点基础研究发展规划项目(批准号: 2004CB418300)和国家自然科学基金(批准号: 40475032 和 40275031)资助.

† 通讯联系人.

... , u_{k-1} 已知. (1) 式包含所有常用的数值算法, 若 $k = 1$, 为单步算法, 若 $k > 1$, 为多步算法. 同时若函数 Φ 与 u_{m+k} 无关, 称之为显式算法, 反之称为隐式算法. 函数 Φ 中的 $f(u, t)$ 为常微分方程的右端项.

显然地 (1) 式又可以写成

$$u_{m+k} = u_{m+k-1} + F_{m+k-1}, \quad (2)$$

其中

$$F_{m+k-1} = \tilde{\alpha}_{k-1} u_{m+k-1} + \tilde{\alpha}_{k-2} u_{m+k-2} + \dots + \tilde{\alpha}_0 u_m + h\tilde{\Phi}(t_m, u_{m+k}, u_{m+k-1}, \dots, u_m; h, f), \quad (3)$$

$$\tilde{\alpha}_{k-1} = -\frac{\alpha_{k-1}}{\alpha_k} - 1,$$

$$\tilde{\alpha}_j = -\frac{\alpha_j}{\alpha_k} (j = 0, 1, \dots, k-2),$$

$$\tilde{\Phi} = \frac{\Phi}{\alpha_k}.$$

定义 1 若一数值差分格式可写为

$$u_{m+1} = \beta_0(m)u_m + \beta_{-1}(m)u_{m-1} + \dots + \beta_{-p}(m)u_{m-p} + \theta_0(m)F_m + \theta_{-1}(m)F_{m-1} + \dots + \theta_{-p}(m)F_{m-p}, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

则称此计算格式为 p 阶多时次差分格式. 称 $\beta_i(m)$, $\theta_i(m)$, $i = 0, -1, \dots, -p$ 为自忆系数, F 为动力核.

定义 2 任给初值 $u_{-p-k}, u_{-p-k+1}, \dots, u_{-p-1}$, 由某一算法 (1) 式生成时间序列

$$u_{-p}, u_{-p+1}, \dots, u_0, u_1, \dots, u_m, \dots \quad (5)$$

若 (4) 式以 (5) 式中的 $u_{-p}, u_{-p+1}, \dots, u_0$ 为初值进行积分, 可生成时间序列

$$\tilde{u}_1, \tilde{u}_2, \dots, \tilde{u}_m, \dots \quad (6)$$

且 $\tilde{u}_1 \equiv u_1, \tilde{u}_2 \equiv u_2, \dots, \tilde{u}_m \equiv u_m, \dots$, 则称 p 阶多时次差分格式 (4) 与此算法相协调.

定理 1 任给一算法

$$u_m = u_{m-1} + F_{m-1}, \quad (7)$$

可以构造出形如 (4) 式的 p 阶多时次差分格式与其相协调, 只要自忆系数满足

$$\begin{cases} \theta_0(m) = \beta_0(m) + \beta_{-1}(m) + \dots + \beta_{-p}(m) = 1, \\ \theta_{-1}(m) = \beta_{-1}(m) + \beta_{-2}(m) + \dots + \beta_{-p}(m) \\ \dots \\ \theta_{-p}(m) = \beta_{-p}(m). \end{cases} \quad (8)$$

证明 任给初值 $u_{-p-k}, u_{-p-k+1}, \dots, u_{-p-1}$, 由

给定算法 (7) 可生成时间序列

$$u_{-p}, u_{-p+1}, \dots, u_0, u_1, \dots, u_m, \dots \quad (9)$$

显然有下式成立:

$$\begin{cases} u_1 = u_0 + F_0, \\ u_0 = u_{-1} + F_{-1}, \\ \dots \\ u_{-p+1} = u_{-p} + F_{-p}. \end{cases} \quad (10)$$

对上式依次前一式、前两式……前 $p+1$ 式进行相加, 可得

$$\begin{cases} u_1 = u_0 + F_0, \\ u_1 = u_{-1} + (F_0 + F_{-1}), \\ \dots \\ u_1 = u_{-p} + (F_0 + F_{-1} + \dots + F_{-p}). \end{cases} \quad (11)$$

因此, $\forall \beta_i, i = 0, -1, \dots, -p$, 显然有下式成立:

$$\begin{cases} \beta_0 u_1 = \beta_0 u_0 + \beta_0 F_0, \\ \beta_{-1} u_1 = \beta_{-1} u_{-1} + \beta_{-1} (F_0 + F_{-1}), \\ \dots \\ \beta_{-p} u_1 = \beta_{-p} u_{-p} + \beta_{-p} (F_0 + F_{-1} + \dots + F_{-p}). \end{cases} \quad (12)$$

若

$$\beta_0 + \beta_{-1} + \dots + \beta_{-p} = 1, \quad (13)$$

将 (12) 式中各式相加, 可得

$$u_1 = \beta_0 u_0 + \beta_{-1} u_{-1} + \dots + \beta_{-p} u_{-p} + \theta_0 F_0 + \theta_{-1} F_{-1} + \dots + \theta_{-p} F_{-p}, \quad (14)$$

其中

$$\begin{cases} \theta_0 = \beta_0 + \beta_{-1} + \dots + \beta_{-p} = 1, \\ \theta_{-1} = \beta_{-1} + \beta_{-2} + \dots + \beta_{-p}, \\ \dots \\ \theta_{-p} = \beta_{-p}. \end{cases} \quad (15)$$

考虑到 u_m, β_i 的任意性, 可将上述差分格式 (14) 写为形如 (4) 式与积分时间 m 有关的形式. 又由推导过程的严格等价性及定义 2, 考虑约束条件 (13) 和 (15) 知此 p 阶多时次差分格式与算法 (7) 相协调. 证毕.

若记 $U_j(m) = u_{m+j} + \sum_{i=0}^j F_i, j = 0, -1, \dots, -p$,

由定理 1 的证明过程不难看出, p 阶相协调的多时次差分格式可以写为

$$u_{m+1} = \beta_0(m)U_0(m) + \beta_{-1}(m)U_{-1}(m) + \dots + \beta_{-p}(m)U_{-p}(m), \quad (16)$$

其中 $\beta_0(m) + \beta_{-1}(m) + \dots + \beta_{-p}(m) = 1$, 所以上式又可写为

$$\begin{aligned}
u_{m+1} = & \beta_0(m)(U_0(m) - U_{-p}(m)) \\
& + \beta_{-1}(m)(U_{-1}(m) - U_{-p}(m)) + \dots \\
& + \beta_{-p+1}(m)(U_{-p+1}(m) - U_{-p}(m)) \\
& + U_{-p}(m). \tag{17}
\end{aligned}$$

将上式与多时次差分格式(4)进行比较,可以发现同样回溯阶 p 的条件下,新构造的相协调的多时次差分格式只需拟合 p 个自忆系数,而格式(4)则需要求出 $2p + 2$ 个自忆系数,这对实际的计算十分有利。

然而新格式(17)需要与原始算法相协调,决定了它的积分步长必须和原始计算格式一致,而实际的观测间隔往往和步长不一致,传统的多时刻模式也正因为此要取较大的步长.本文对这一问题作如下技术处理.

设观测间隔为 $\delta T = nh$, h 为原始算法的积分步长,可以用已有真实观测时刻的观测值作为初值,用原始算法向前积分 $n - 1$ 个步长作为无观测时刻的“观测值”,这一过程只是在预报的开始阶段需要,因为新格式每次的积分结果都是以步长 h 为单位的.可是这时还有一个问题需要解决,对于传统的 p 阶多时刻模式,可以同时使用 $p + 1$ 个真实独立的观测值,而对于新格式则意味着是 $n(p + 1) - 1$ 阶,大大增加计算量并造成算法的困难,本文认为可以在同一个观测间隔 δT 内取相同的自忆系数,这样就仍然只需拟合 p 个自忆系数,却用到了 $p + 1$ 个真实独立的观测值.

3. 多时次差分格式的稳定性

本文提出的多时次差分格式(4),尽管与求解常微分方程的线性多步法有相似之处,但它们二者之间有着本质的不同.一方面,用多时次差分格式进行计算时同时使用多个独立的观测值,而线性多步法所使用的多个初值却仍是由一个观测值生成的,并不独立;另一方面,多时次差分格式具有随时间演变的自忆系数,且自忆系数的获得是由更长时间独立的观测资料拟合而来的,最后,多时次差分格式的动力核具有灵活的形式,并不像线性多步法中的动力核只是简单的取微分方程的右端项,实际上从相协调的多时差分格式的构造过程来看,完全可以在线性多步法的基础上架构多时次差分格式.不过,对多时次差分格式计算稳定性的研究,却可以借鉴求解常微分方程的线性多步法的计算稳定性理论,下文

未给出具体证明的命题可参考文献[12].

3.1. 线性差分方程解有界的一个充分条件

为研究多时次差分格式的稳定性,我们首先引入线性差分方程的概念.

定义 3 p 阶线性差分方程是指如下的关系式

$$\begin{aligned}
& \beta_p(m)u_{m+p} + \beta_{p-1}(m)u_{m+p-1} + \dots \\
& + \beta_0(m)u_m = b_m, \tag{18}
\end{aligned}$$

其中 $\beta_j(m)$ $j = 0, 1, 2, \dots, p$, b_m 为给定的关于 m 的函数,并且 $\beta_p(m) \neq 0, \beta_0(m) \neq 0$. 当 $b_m = 0$ 时(18)式为

$$\begin{aligned}
& \beta_p(m)u_{m+p} + \beta_{p-1}(m)u_{m+p-1} + \dots \\
& + \beta_0(m)u_m = 0, \\
& m = 0, 1, 2, \dots, \tag{19}
\end{aligned}$$

称为 p 阶齐次线性差分方程.

命题 1 如果 $u_m^{(1)}, u_m^{(2)}, \dots, u_m^{(p)}$ 是 p 阶齐次线性差分方程(19)的解,则它们的任意线性组合

$$v_m = c_1 u_m^{(1)} + c_2 u_m^{(2)} + \dots + c_p u_m^{(p)} \tag{20}$$

也是(19)的解,其中 c_j ($j = 1, 2, \dots, p$)为常数.

命题 2 设 $u_m^{(1)}, u_m^{(2)}, \dots, u_m^{(p)}$ 是 p 阶齐次线性差分方程(19)的解,并且行列式

$$\begin{vmatrix}
u_1^{(1)} & u_1^{(2)} & \dots & u_1^{(p)} \\
u_2^{(1)} & u_2^{(2)} & \dots & u_2^{(p)} \\
\dots & \dots & \dots & \dots \\
u_p^{(1)} & u_p^{(2)} & \dots & u_p^{(p)}
\end{vmatrix} \neq 0, \tag{21}$$

则齐次差分方程(19)的任何解均可表成(20)的形式,此时称(20)式为(19)式的通解.

命题 3 如果 $u_m^{(1)}, u_m^{(2)}, \dots, u_m^{(p)}$ 为 p 阶齐次线性差分方程(19)的线性无关解,则(18)的通解可以表为

$$u_m = \sum_{j=1}^p c_j u_m^{(j)} + \sum_{n=0}^{m-p} g_{m,n} b_n, \tag{22}$$

其中 $g_{m,n}$ 为如下差分方程的解:

$$\begin{cases}
\sum_{j=0}^p \beta_j(m)g_{m+j,n} = \delta_{m,n}, m = 0, 1, 2, \dots, \\
g_{l,n} = 0, \text{ 当 } l < n + p \text{ 时}, m = 0, 1, 2, \dots,
\end{cases} \tag{23}$$

其中

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 0, & \text{当 } m \neq n, \\ 1, & \text{当 } m = n. \end{cases}$$

为研究的方便,我们在 R^n 中引入内积与范数. 设 $u, v \in R^n, u = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T, v = (v_1, v_2, \dots, v_n)^T,$

定义 $(u, v) = \sum_{i=1}^n u_i v_i$ 为 R^n 中的内积. 同时引入以下两种范数

$$\|u\|_2 = (u_1^2 + u_2^2 + \dots + u_n^2)^{1/2},$$

$$\|u\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |u_i|$$

分别称为 2-范数和 ∞ -范数.

定理 2 若记 p 阶齐次线性差分方程为如下形式:

$$u_{m+p} = \beta_{p-1}(m)u_{m+p-1} + \beta_{p-2}(m)u_{m+p-2} + \dots + \beta_0(m)u_m,$$

$$m = 0, 1, 2, \dots \quad (24)$$

并记 $\beta(m) = (\beta_{p-1}(m), \beta_{p-2}(m), \dots, \beta_0(m))^T$, 给定初值 $u(0) = (u_{p-1}, u_{p-2}, \dots, u_0)^T$, 若 $\|u(0)\|_\infty \leq M$, 且 $\|\beta(m)\|_2^2 \leq 1/p$, 则 (24) 式的解 $|u_m| \leq M$.

证明 取 $m = 0$, 由 (24) 式知

$$|u_p| = |(\beta(0), u(0))|, \quad (25)$$

使用 Cauchy-Schwartz 不等式, 由上式可得

$$|u_p|^2 \leq (\beta(0), \beta(0)) (u(0), u(0))$$

$$\leq \frac{1}{p} (u_0^2 + u_1^2 + \dots + u_{p-1}^2)$$

$$\leq \frac{1}{p} (\|u(0)\|_2^2 + \|u(0)\|_\infty^2 + \dots + \|u(0)\|_\infty^2)$$

$$= \|u(0)\|_\infty^2 \leq M^2. \quad (26)$$

所以 $|u_p| \leq M$. 此时有 $u(1) = (u_p, u_{p-1}, \dots, u_1)^T$, 从而 $\|u(1)\|_\infty \leq M$, 不难看出, 以此类推, 任给 m , 总有 $|u_m| \leq M$. 证毕.

3.2. 多时次差分格式稳定的一个充分条件

定义 4 多时次差分格式

$$u_{m+p} = \beta_{p-1}(m)u_{m+p-1} + \beta_{p-2}(m)u_{m+p-2} + \dots + \beta_0(m)u_m + \theta_{p-1}(m)F_{m+p-1} + \theta_{p-2}(m)F_{m+p-2} + \dots + \theta_0(m)F_m \quad (27)$$

称为稳定的, 如果对任何关于 u_m 满足 Lipschitz 条件的 $\tilde{F}_m = F_m/h$, 存在常数 c 及 h_0 , 使得当 $0 < h < h_0$ 时 (27) 式的任何二解满足不等式

$$\max_{mh \leq T} |u_m - v_m| \leq CM_0, \quad (28)$$

其中 $M_0 = \max_{0 \leq j < p} |u_j - v_j|$.

定理 3 记 $\beta(m) = (\beta_{p-1}(m), \beta_{p-2}(m), \dots, \beta_0(m))^T$, $\theta(m) = (\theta_{p-1}(m), \theta_{p-2}(m), \dots, \theta_0(m))^T$. 若 $\|\beta(m)\|_2^2 \leq 1/p$, 且 $\|\theta(m)\|_\infty \leq B$, $m = 0, 1, 2, \dots$, 则多时次差分格式 (27) 稳定.

证明 设 u_{m+p}, v_{m+p} 为 (27) 式的任意二解, 则

$\epsilon_{m+p} = u_{m+p} - v_{m+p}$ 满足下列关系:

$$\epsilon_{m+p} = \sum_{j=0}^{p-1} \beta_j(m) \epsilon_{m+j} + b_m, \quad (29)$$

其中

$$b_m = \sum_{j=0}^{p-1} \theta_j(m) h [\tilde{F}_{m+j}(u_{m+j}) - \tilde{F}_{m+j}(v_{m+j})] \quad (30)$$

据命题 3, ϵ_{m+p} 可以表为

$$\epsilon_{m+p} = \sum_{j=0}^{p-1} c_j w_{m+p}^{(j)} + \sum_{n=0}^m g_{m+p,n} b_n, \quad (31)$$

其中 $w_{m+p}^{(j)} (j = 0, 1, \dots, p-1)$ 为齐次差分方程 $\epsilon_{m+p} = \sum_{j=0}^{p-1} \beta_j(m) \epsilon_{m+j}$ 的线性无关解, $g_{m+p,n}$ 是此齐次方程满足初始条件

$$g_{n+p,n} = 1, g_{n+j,n} = 0, j = 1, 2, \dots, p-1 \quad (32)$$

的解. 因自忆系数 $\beta_j(m), j = 0, 1, 2, \dots, p-1$ 满足给定条件, 由定理 2 知 $w_{m+p}^{(j)}, g_{m+p,n}$ 有界, 设其上界为 M , 由 (31) 式得到

$$|\epsilon_{m+p}| \leq M \left(\sum_{j=0}^{p-1} |c_j| + \sum_{n=0}^m |b_n| \right). \quad (33)$$

注意 c_j 可以表为 $\epsilon_0, \epsilon_1, \dots, \epsilon_{p-1}$ 的线性组合. 这样一来, 若令 $M_0 = \max_{0 \leq j < p} |\epsilon_j|$, 则由 (33) 式导出

$$|\epsilon_{m+p}| \leq DM_0 + M \sum_{n=0}^m |b_n|, \quad (34)$$

其中 D 为常数. 利用 (30) 式并注意 \tilde{F} 满足 Lipschitz 条件, 从 (34) 式容易算出

$$|\epsilon_{m+p}| \leq DM_0 + hMLB \sum_{n=0}^m \sum_{j=0}^{p-1} |\epsilon_{n+j}|$$

$$= DM_0 + hMLB \sum_{j=0}^{p-1} \sum_{n=j}^{m+j} |\epsilon_n|$$

$$\leq DM_0 + hMLBp \sum_{n=0}^{m+p-1} |\epsilon_n|, \quad (35)$$

式中 L 为 Lipschitz 常数. 令 $M_1 = MLBp$, 若 $mh \leq T - t_0$, 利用离散型 Bellmann 不等式, 从 (35) 式导出

$$|\epsilon_{m+p}| \leq e^{M_1(T-t_0)} (D + hpM_1) M_0, \quad (36)$$

即 (27) 式稳定. 证毕.

值得说明的是, 定理 3 的证明考虑了自忆系数随时间的变化, 实际上给出了一个自忆系数的稳定域. 因为由定理 2 知道, 满足一定条件的变化的自忆系数仍能保证线性齐次方程解的有界, 从而有力地保证了多时次差分格式计算的稳定性.

现在我们来考察一个特殊的 p 阶相协调的多时次差分格式, 若 (17) 式中的自忆系数取为常数, 且

$\beta_0(m) = \beta_{-1}(m) = \dots = \beta_{-p}(m) \equiv \frac{1}{p+1}$, 可将其写成

$$u_{m+1} = \frac{1}{p+1}u_m + \frac{1}{p+1}u_{m-1} + \dots + \frac{1}{p+1}u_{m-p} + F_m + \left(1 - \frac{1}{p+1}\right)F_{m-1} + \dots + \left(1 - \frac{p}{p+1}\right)F_{m-p}. \quad (37)$$

推论 (37) 式是稳定的.

结论是显然的. 这一点在下文中会看到有着重要的实际应用价值.

4. 对最小二乘法的改进

我们建立的 p 阶相协调的多时次差分格式 (17) 中的自忆系数是灵活可变的, 在实际计算中, 用最小二乘法来拟合自忆系数.

任给时间序列

$$u_{-l}, u_{-l+1}, \dots, u_{-p}, u_{-p+1}, \dots, u_0, \quad l \gg p, \quad (38)$$

则可建立拟合方程组

$$Ax = b, \quad (39)$$

其中

$$A = \begin{pmatrix} U_0(-1) - U_{-p}(-1) & \dots & U_{-p+1}(-1) - U_{-p}(-1) \\ U_0(-2) - U_{-p}(-2) & \dots & U_{-p+1}(-2) - U_{-p}(-2) \\ \dots & \dots & \dots \\ U_0(-l+p) - U_{-p}(-l+p) & \dots & U_{-p+1}(-l+p) - U_{-p}(-l+p) \end{pmatrix},$$

$$x = \begin{pmatrix} \beta_{-1}(0) \\ \beta_{-2}(0) \\ \dots \\ \beta_{-p}(0) \end{pmatrix},$$

$$b = \begin{pmatrix} u_0 - U_{-p}(-1) \\ u_{-1} - U_{-p}(-2) \\ \dots \\ u_{-l+p+1} - U_{-p}(-l+p) \end{pmatrix},$$

其中 A 为 $(l-p) \times p$ 矩阵, x 为 $p \times 1$ 矩阵, b 为 $(l-p) \times 1$ 矩阵, 因此一般的最小二乘问题便提为求 (39) 式的广义解问题, 即

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b. \quad (40)$$

在实际计算中, 向前积分后, 可剔除最后的观测值, 补入新的计算值, 重新计算 A, x 及 b , 再求解 (40) 式, 如此反复, 不断向前积分, 使自忆系数具有自适应特征, 即可实现格式 (17) 的运算, 又可以利用多个时刻的观测资料.

由于矩阵 $A^T A$ 常常是病态的, 人们通常采用奇异值分解方法来处理直接求逆的困难, 然而已有研究表明^[13], 这种做法对改善解的计算精度没有明显的效果. 而且多时刻模式的计算经验表明, 直接用此法拟合出来的自忆系数量级往往相差较大, 为保证计算效果与计算稳定性, 对得到的自忆系数进行标准化是常常采用的手段^[10], 而这样又有可能使解的计算精度进一步降低. 因此, 对最小二乘法进行改进

是必需的.

求解方程组 (39) 显然等价于如下的极小问题:

$$\min J(x) = \frac{1}{2} (Ax - b)^T (Ax - b), \quad (41)$$

采用优化下降算法求解 x , 但 A 的病态同样会严重影响计算效果, 因而本文将转化为另外一个等价的极小问题:

$$\min J(y) = \frac{1}{2} (Fy - g)^T (Fy - g), \quad (42)$$

其中 $F = S^{-1} \tilde{A} S^{-T}, g = S^{-1} \tilde{A}^T b, x = S^{-T} y, \tilde{A} = A^T A + \alpha I, \alpha$ 为一适当的正数, I 为单位矩阵, 将 \tilde{A} 分解为 $\tilde{A} = D - L - U, D$ 是由 \tilde{A} 对角元组成的对角矩阵, $-L$ 为 \tilde{A} 的严格下三角阵, $L = U^T$. 可得 $S = (D - L) D^{-1/2}$. 这样可以使矩阵 F 的条件数大约是矩阵 \tilde{A} 的条件数的平方根^[14]. 这样做的好处还在于, 对拟合矩阵条件数的改善也变为自适应的了, 因为用格式 (17) 做滑动预报时, 拟合矩阵的条件数也是随着积分时间不断变化的.

尽管如此,由于舍入误差对拟合矩阵的条件数非常敏感,目标函数 $J(y)$ 往往仍然存在多个极小点.为取得好的计算效果,更重要的也是为了保证格式(17)的计算稳定性,如何选取优化算法的初始猜值成为一个需要认真对待的问题.一个自然的想法是,若用理论上可以保证稳定的(37)式的自忆系数作为 x 的初猜值,即取 $x_0 = (1(p+1), 1(p+1), \dots, 1(p+1))^T$, 在其附近寻找与其相邻的极小点,可能会使格式(17)不仅可以取得好的计算效果,而且可以改善其计算稳定性.因为定理3的结论其实还说明在这个初猜值的邻域是一个计算稳定的区域.

为了直观理解最小二乘改进的必要性,我们以 Hilbert 矩阵为例来进行说明.记 $n \times n$ 的 Hilbert 矩阵为 H_n , $h(i, j)$ 为其第 i 行第 j 列的元素,则 $h(i, j) = 1/(i+j-1)$. 考虑如下病态方程组:

$$H_n x = b, \tag{43}$$

其中 x 为 $n \times 1$ 矩阵, b 为 $n \times 1$ 矩阵.取 $x_R = (1, 1, \dots, 1)^T$, $b = H_n x_R$, 则 x_R 为方程组(43)式的解.

取 $n = 20$, 分别用奇异值分解,变分法(41)与变分预处理(42)来求解方程组(43)下降算法均为 DFP 变度量算法^[15]).对于奇异值分解法,我们舍弃小于 0.01 的特征值与其对应的特征向量,可得解

x_s 由(41)式可求得此时的目标函数值 $J(x_s) = \frac{1}{2}(H_{20}x_s - b)^T(H_{20}x_s - b) \approx 5.3 \times 10^{-6}$, 若再对 x_s 进行标准化,使其各分量的平方和为 1, 可得解 \tilde{x}_s , 此时 $J(\tilde{x}_s) \approx 14$. 对于变分法,取初猜值 $x^0 = (2, 2, \dots, 2)^T$, 可得解 x_V , 此时 $J(x_V) \approx 1.2 \times 10^{-6}$. 对于变分预处理法,取同样的初猜值,可得解 x_{VP} , 此时 $J(x_{VP}) \approx 1.2 \times 10^{-7}$. 因此,不难看出,极小化方法可以有效提高病态方程组解的精度,而预处理技巧又可使解的精度进一步改善.若直接对奇异值分解方法所求得解进行标准化,则会大大降低解的精度.

现在我们来考察一下目标函数的形态.显然, $x_R = (1, 1, \dots, 1)^T$ 为目标函数的一个极小点,此时 $J(x_R) = 0$, 同时记此点为 A 点.若取初猜值 $x^0 = (10, 10, \dots, 10)^T$ 由变分预处理法可得另一极小点 x_{VP1} , 此时 $J(x_{VP1}) \approx 8.3 \times 10^{-7}$, 记此点为 B 点.若取初猜值 $x^0 = (20, 20, \dots, 20)^T$, 用同样的方法可再得一极小点 x_{VP2} , 此时 $J(x_{VP2}) \approx 3.9 \times 10^{-6}$, 记此点为 C 点.图 1(a)给出了沿 A, B, C 三点第一分量所作出的目标函数抛物面图,图 1(b)给出了沿 A, B, C 三点第三分量所作出的目标函数抛物面图,考虑到方程维数较高,其他分量的目标函数抛物面图不再一一给出.

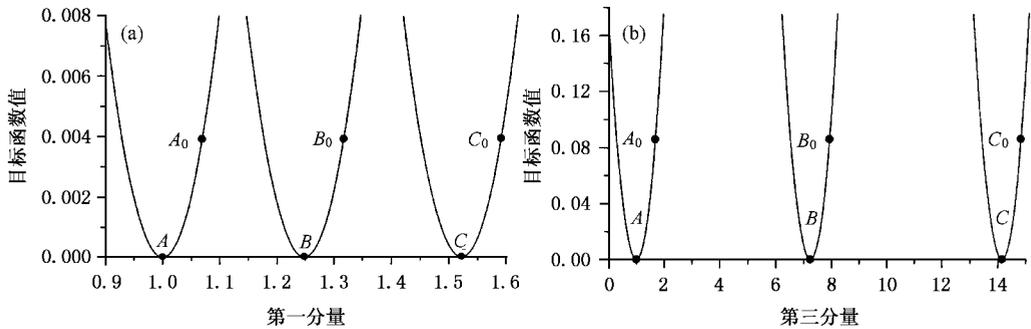


图 1 极小点 A, B, C 所对应的目标函数抛物面图 (a) 沿第一分量 (b) 沿第三分量

由图 1(a)(b)不难看出,矩阵的病态性质造成了目标函数存在多个极小点,若分别取图中的 A_0, B_0 和 C_0 为初始猜值,极小化方法求得的解相应的分别为 A, B 和 C 点.不妨认为 B_0 附近的范围是格式(17)计算稳定的区域,那么初猜值的选取就变得十分重要,因为 A 点和 C 点与 B_0 点的距离远大于

B 点与 B_0 点的距离,所以 B 点所对应的解就更有可能保证计算的稳定性, B_0 点也就是一个好的初猜值.

所以我们可以预期,对最小二乘拟合矩阵和初始猜值的谨慎处理,会在相当程度上保证协调多时次差分格式的计算稳定,同时也使计算效果得以改善.

5. 总 结

提高气候系统的预测水平,是一个富有挑战性的课题^[6].充分考虑对过去资料的使用,建立动力统计相结合的方法来进行预报,是一个正在不断发展的领域.多时刻理论无疑是其中一个重要的方向,可作为反问题的一种提法,同样存在着不稳定性^[13],特别表现为其计算的不稳定.本文针对求解常微分方程的各种算法,提出可以建立与之相协调的多时次差分格式,同时结合改进最小二乘法,来确保计算的稳定性,为最终解决多时刻模式的稳定性问题提供了一个有益的思路.

值得注意的是,决定最小二乘法的算法好坏的一个主要环节,就是对拟合矩阵进行预处理,来降低矩阵的条件数,本文采用的也不过只是一种最基本

的方法.关于预处理的方法,在计算数学领域仍是研究的热点之一^[14],充分吸收这一领域的最新成果,完全可能使多时次差分格式的计算效果得到进一步的提高.

严格的讲,本文只是对多时次差分格式的零稳定性进行了探讨,也只是给出了一个充分条件,并未涉及其绝对稳定性.然而,对其绝对稳定性的研究更具有实际意义,绝对稳定性不仅取决于原始算法,而且也与微分方程本身的性质有关,若进一步考虑到多时次差分格式具有随时间演变的自忆系数,问题变得更为复杂.协调多时次差分格式究竟能在多大程度上保留原始算法的绝对稳定域,仍需深入研究.

总之,对本文提出的协调多时次差分格式稳定性的探讨是具有半经验性质的,无论从严格的数学理论还是从广泛的实际应用来看,进一步的工作都是必要的.

- [1] Gu Z C 1958 *Acta Meteorologica Sinica* **29** 93(in Chinese) [顾震潮 1958 气象学报 **29** 93]
- [2] Gu Z C 1958 *Acta Meteorologica Sinica* **29** 176(in Chinese) [顾震潮 1958 气象学报 **29** 176]
- [3] Chou J F 1974 *Scientia Sinica* **4** 635
- [4] Cao H X 1993 *Science in China* B **36** 845
- [5] Feng G L et al 2001 *Chin. Phys.* **10** 1004
- [6] Feng G L et al 2002 *Acta Mechanica Sinica* **18** 53
- [7] Feng G L et al 2003 *Chin. Phys.* **12** 1076
- [8] Gu X Q et al 2001 *Progress in Natural Science* **11** 393(in Chinese) [谷湘潜等 2001 自然科学进展 **11** 393]
- [9] Gu X Q et al 2004 *Progress in Natural Science* **14** 232(in Chinese) [谷湘潜等 2004 自然科学进展 **14** 232]
- [10] Feng G L 2002 *Numerical Time Integration and Its Application to The Climatic Model*(Lanzhou :the doctoral thesis of Lanzhou University) p130

- [11] Feng G L 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2389(in Chinese) [封国林 2004 物理学报 **53** 2389]
- [12] Li R H and Feng G C 1989 *Numerical Solution of Differential Equation*(Beijing :Higher Education Press)p32(in Chinese) [李荣华,冯果忱 1989 微分方程数值解法(北京:高等教育出版社) p32]
- [13] Wang D G et al 2003 *Advances in Mechanics* **33** 166(in Chinese) [王登刚等 2003 力学进展 **33** 166]
- [14] Li Q Y et al 2002 *Principal of the Numerical Methods*(Beijing : Tsinghua University press)p226 p231(in Chinese) [李庆扬等 2002 数值计算原理(北京:清华大学出版社)第 226,231 页]
- [15] Chen B L 2003 *Theory and Methods of Optimization*(Beijing : Tsinghua University Press)p372(in Chinese) [陈宝林 2003 最优化理论与算法(北京:清华大学出版社) p372]
- [16] Chou J F , Xu M 2001 *Chinese Science Bulletin* **46** 1497

A harmonized multi-time difference scheme and its stability^{*}

Zhang Li-Xin^{1,2)†} Qian Wei-Hong^{2)†} Gao Xin-Quan¹⁾ Chou Ji-Fan¹⁾

¹⁾ College of Atmospheric Sciences, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

²⁾ Monsoon & Environment Research Group, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China)

(Received 29 October 2004 ; revised manuscript received 16 December 2004)

Abstract

In this paper, a harmonized multi-time difference scheme is established, which can be easily constructed on any numerical difference scheme of ordinary differential equations. A sufficiently stable condition is proved in mathematics. If the memorial coefficients determined by an improved method of least square, it is expected that this new scheme can integrate stably in a longer period, and a better result can be achieved.

Keywords : harmonized multi-time difference scheme, stability, the least square

PACC : 9260X

^{*} Project supported by the National Key Program Development for Basic Research (Grant No. 2004CB418300) and the National Natural Sciences Foundation of China (Grant Nos. 40475032 and 40275031).

[†] Corresponding author.