JFNK方法在求解全隐式一维非线性平流方程中的应用

陈长胜[1, 2, 3] 纪立人[2] 陈嘉滨[2] 王盘兴[1]

1 南京信息工程大学大气科学学院，南京 210044
2 中国科学院大气物理研究所，北京 100029
3 吉林省气象台，长春 130062

摘 要 JFNK(Jacobian-free Newton-Krylov)方法是由Newton迭代方法和Krylov子空间迭代方法构成的嵌套迭代方法。作者以全隐式差分的一维非线性平流方程（亦称无粘Burgers方程）探讨采用全隐式格式计算的必要性和JFNK方法的有效性。模拟结果表明，隐式结果比显式和半隐式结果在稳定度和精度方面较大的优越性，特别是模拟气流强的系统以及要素空间分布具有较大梯度的系统。

关键词 JFNK方法 一维非线性平流方程 全隐式差分

文章编号 1006－9895（2007）05－0963－10 **中图分类号** P435 **文献标识码** A

An Application of JFNK Method to Solving the 1D Nonlinear Advection Equation in Fully Implicit Scheme

CHEN Chang-Sheng[1, 2, 3], JI Li-Ren[2], CHEN Jia-Bin[2], and WANG Pan-Xing[1]

1 *College of Atmospheric Sciences, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing* 210044
2 *Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100029
3 *Jilin Meteorological Observatory, Changchun* 130062

Abstract Over the last 10 years it had major advantages in super computing that the higher and higher resolution was adopted in atmospheric numerical models for various scales. And this in turn provides possibility and necessity for using an implicit scheme. Zeng and Ji proposed a scheme with energy conservation in 1981. However, the convergence of iteration involved in the fully implicit scheme remains a key issue to solve. JFNK (Jacobian-free Newton-Krylov) method, a highly efficient method for solving implicit nonlinear equation, has been successfully used in many fields of computational physics.

JFNK method is a nested iteration method for solving the nonlinear partial differential equations (PDEs), which is synergistic combination of Newton-type method and Krylov subspace method, without forming and storing the elements of the true Jacobian matrix. Some studies have shown that the fully implicit method solved by JFNK is more efficient and accurate than the semi-implicit method for a given level of accuracy and for a given CPU time.

This paper, based on the 1D nonlinear advection equation (namely the inviscid Burgers equation), a number of comparative simulations, with the 2-order fully implicit (IM) schemes, the 2-order explicit (EX) schemes and 2-order semi-implicit (SI) schemes, have been carried out to investigate the necessity of adopting fully implicit schemes and the effect of JFNK method. The results show that the implicit scheme has better performance in comparison with the other two schemes in terms of computational stability and accuracy, especially for the simulation of flow system with strong current or large gradient of variables. These can be summarized as follows.

收稿日期 2006－04－18，2006－12－11收修定稿
资助项目 国家自然科学基金资助项目40545020
作者简介 陈长胜，男，1976年出生，博士研究生，工程师，主要从事数值预报与气候预测研究。E-mail：chencs_iap@163.com

(1) When the time step is smaller (say time step is 2^{-9}), all the three schemes are stable; but the accuracy of IM scheme is higher than it of the others. And with the increase of time step, the IM scheme remains stable, while the other two become unstable up to time step is 2^{-3} when basic flow is 0.0, time step is 2^{-4} when basic flow is 1.0, and time step is 2^{-5} when basic flow is 2.0.

(2) With the increase of basic flow, the advantage of IM scheme over the others becomes even more remarkable with respect to the accuracy and stability.

(3) In the region of sharp gradient of variable, the IM scheme still shows clearly smooth and accurate simulation, while for the SI and EX schemes false perturbations occur there and disperse both upstream and downstream gradually.

The successful application of JFNK methods on the inviscid burgers equation shows the prospect for the application of the method to more complicated nonlinear equation in future.

Key words JFNK method, 1D nonlinear advection equation, fully implicit scheme

1 引言

一直以来，时间差分方案作为数值模式的一个主要问题备受关注，优秀的时间差分方案不但要很好地解决模式计算的稳定性问题，同时也要具有较高的计算精度以及计算效率。现在，各国业务模式中应用的时间差分方案以半隐式为主，然而，这种在方程中对产生快波项和慢波项分别采用显式和隐式差分的做法造成不协调，从而形成新的误差源，同时其容许的时间步长仍未能满足数值天气预报的需要。近年为满足多尺度预报的需要，模式分辨率逐渐提高，然而众多数值试验的结果表明[1～5]，模式分辨率的细化并不一定能改善预报。未来的数值预报模式，只有向全隐式格式发展，才有助于解决上述问题。曾庆存等[6]、季仲贞等[7]先后提出了全隐式能量守恒格式和完全平方守恒格式，但目前全隐式格式计算的迭代收敛问题尚未得到很好解决。JFNK 方法[8]的提出为求解非线性方程提供了一个有效的途径。此后，很多学者针对这一方法做了大量的基础性研究，比如，Brown 等[9]在文献[10]的基础上给出了 JFNK 方法的收敛理论；文献[11～13]则讨论了计算过程中可能出现的一些非正常收敛现象；文献[14～18]讨论了多重网格（Multigrid）预条件的 JFNK 方法。Reisner 等[19～21]也曾对 JFNK 方法在大气运动模式中的应用进行了初步的尝试，并提出较为成熟的基于物理机制的预条件处理方案。但该方法目前并不被更多人所认识，特别在气象领域的应用工作开展较少。

一维非线性平流方程（无粘 Burgers 方程）是形式最简单的非线性偏微分方程，有解析解，同时其解析解可以描述要素场突变现象（scale collapse）。Kuo 等[22]和王军等[23]分别应用无粘 Burgers 方程研究半拉格朗日和完全非内插半拉格朗日时间差分方案的计算性能。本文在介绍 JFNK 这一新方法的基础上，应用 JFNK 方法对全隐式的差分一维非线性平流方程进行求解。通过对该计算结果与显式差分格式、半隐式格式的模拟结果的比较，分析全隐式方案的优势，特别是在要素空间分布存在较大梯度的形势下该格式较其他格式的优越性，为今后发展全隐式框架的数值模拟提供基础性的工作。

本文在第 2 节给出一维非线性平流方程性质及其差分形式；第 3 节简单介绍 JFNK 方法；第 4 节对模拟结果进行分析；第 5 节对本文工作的主要结果进行小结和讨论。

2 一维非线性平流方程的性质及其隐式差分格式

2.1 一维非线性平流方程的基本特征

一维非线性平流方程（inviscid Burgers equation）[22]，其形式如下：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0. \tag{1}$$

当给定如下初值，

$$u(x,0) = f(x) = \bar{u} - \arctan(x - x_0), \tag{2}$$

其解析解为

$$u = \bar{u} - \arctan(x - ut - x_0). \tag{3}$$

此时，对（3）式取 x 方向的微分，有

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1 - t\dfrac{\partial u}{\partial x}}{1 + (x - x_0 - ut)^2}, \tag{4}$$

在 $x = x_0 + \bar{u}t$ 处，

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{x=x_0+\bar{u}t} = \frac{1}{t-1}, \tag{5}$$

所以当 $t \to 1$ 时，

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{x=x_0+\bar{u}t} \to -\infty. \tag{6}$$

也就是说，此时该方程在 $x=x_0+\bar{u}t$ 处空间分布梯度很大，出现奇异点（也称突变点）。因此，$t=1$ 时刻也被称为尺度分裂时间（the scale collapse time）。

2.2 隐式差分格式

令 $u=\bar{u}+u'$，展开

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

有

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + u'\frac{\partial u'}{\partial x} + \bar{u}\frac{\partial u'}{\partial x} = 0. \tag{7}$$

为书写方便，略去“′”号，有

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + \bar{u}\frac{\partial u}{\partial x} = 0. \tag{8}$$

全隐式二阶 Crank-Nicholson 格式（简记为 IM 格式）差分方程

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t} + \frac{1}{2}\left[(u_j^{n+1}+\bar{u})\frac{u_{j+1}^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} + (u_j^n+\bar{u})\cdot \frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2\Delta x}\right] = F_j^{n+1}, \quad j=1, N+1 \tag{9}$$

其中，N 为空间网格数，n 为时间层。

作为比较，同时对二阶半隐式格式（SI）差分方程

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\Delta t} + u_j^n\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{1}{2}\left(\bar{u}\frac{u_{j+1}^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \bar{u}\frac{u_{j+1}^{n-1}-u_{j-1}^{n-1}}{2\Delta x}\right) = 0, \quad j=1, N+1 \tag{10}$$

和显式二阶中央差分格式（记为 EX 格式）差分方程

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\Delta t} + (u_j^n+\bar{u})\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0, \quad j=1, N+1 \tag{11}$$

进行了计算分析。

3 JFNK 方法及预条件

3.1 JFNK 方法

JFNK 是嵌套迭代方法[8, 21]，它至少包括有两层迭代嵌套：外层为非线性 Newton 迭代，内层为 Krylov 子空间线性迭代，同时在 Krylov 迭代过程中应用 Jacobian-free 近似。

考虑形如

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{12}$$

的非线性系统方程组，其中 $\boldsymbol{F}$ 为非线性残差向量，$\boldsymbol{x}$ 为未知变量向量。对于变量 $\boldsymbol{x}$ 的当前值 $\boldsymbol{x}^k$，根据泰勒展开，得

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{k+1}) = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k) + \boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^k)(\boldsymbol{x}^{k+1}-\boldsymbol{x}^k) + O[(\delta\boldsymbol{x}^k)^2], \tag{13}$$

滤除上式右端高阶余项，可以得到 Newton 迭代的公式：

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}^k)\delta\boldsymbol{x}^k = -\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k), \tag{14}$$

式中，$\boldsymbol{k}$ 为 Newton 迭代的步数，$\boldsymbol{J}\equiv\boldsymbol{F}'$ 为 Jacobian 矩阵，

$$J_{i,j}(\boldsymbol{x}^k) = \frac{\partial F_i(\boldsymbol{x}^k)}{\partial x_j}, \tag{15}$$

$$\delta\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k, \tag{16}$$

最后以下式作为终止迭代计算的判据

$$\frac{\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k)\|}{\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^0)\|} < \varepsilon_n, \tag{17}$$

其中，ε_n 为非线性迭代收敛的标准，是足够小量（本文取 $\varepsilon_n=1.0\times10^{-7}$）。

可见方程组（14）是关于 $\delta\boldsymbol{x}^k$ 的线性系统，但 Newton 迭代方法应用有两大难点，分别是生成并存储 Jacobian 矩阵和给出位于其收敛半径内的初估值。梁恒等[24]指出每一步 Newton 迭代中计算 Jacobian 矩阵和求解线性方程组（14）的代价相当高，特别当迭代初值远离真解时，高精度求解线性方程组（14）的 Newton 迭代点带有相当的盲目性。因此，需要 Krylov 子空间线性迭代法[25]求解牛顿迭代公式。Krylov 子空间迭代方法是一类非常有效的求解大型线性方程组的投影迭代算法（详情见附录），本文应用这一类方法中的广义最小残量法（GMRES，Generalized Minimal Residual algorithm）[26]。

对于方程组（14），给定一初始解 $\delta\boldsymbol{x}_0^k$，得到初始残量

$$\boldsymbol{r}_0 = -\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k) - \boldsymbol{J}\delta\boldsymbol{x}_0^k, \tag{18}$$

取

$$\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}_0}{\theta}, \tag{19}$$

其中，$\theta=(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0)^{1/2}$。由 $\boldsymbol{v}_1$ 出发，利用 Arnodi 方法[27]构造 Krylov 子空间$\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_m\}$，这组 m 维的正交基，记为 $\boldsymbol{V}_m=[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_m]$。最后计算

$$\delta\boldsymbol{x}_m^k = \delta\boldsymbol{x}_0^k + a_1\boldsymbol{v}_1 + \cdots + a_m\boldsymbol{v}_m, \tag{20}$$

这里系数 $a_1, \cdots, a_m$ 需满足 $\boldsymbol{r}_m = -\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k) - \boldsymbol{J}\delta\boldsymbol{x}_m^k$ 的 Eucild 范数最小。

Krylov 迭代直到满足如下条件即可停止，

$$\frac{\| \boldsymbol{J}\delta\boldsymbol{x}_m^k + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k) \|}{\| \boldsymbol{J}\delta\boldsymbol{x}_0^k + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k) \|} < \gamma \| \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k) \|, \tag{21}$$

其中，γ 为一指定常数，在本文中取 $\gamma = 1.0 \times 10^{-3}$。

需注意的是，在上述计算过程中（18）式和（21）式的计算以及 Krylov 子空间的构造都涉及计算 Jacobian 矩阵与向量的乘积。考虑到计算过程中 Jacobian 矩阵的生成、计算以及存储的困难，根据 Taylor 展开，对 Jacobian 矩阵与向量的乘积采用下面的 Jacobian-free 近似：

$$\boldsymbol{Jv} = \frac{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x} + \varepsilon\boldsymbol{v}) - \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\varepsilon}, \tag{22}$$

式中，ε 为小的扰动参数。很显然 ε 的大小跟 $\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{v}$ 的量级有关。如果 ε 太大则近似的结果较差，而 ε 值太小，则结果会受到系统计算的浮点舍入误差的影响。文献[8，28，29]给出了不同的 ε 取值方案。本文采用文献[28]提出的 ε 取值方案，即

$$\varepsilon = \frac{1}{N \| \boldsymbol{v} \|_2} \sum_{i=1}^{n} \alpha \mid \boldsymbol{x}_i \mid, \tag{23}$$

式中，α 是一常数，本文中取 $\alpha = 1.0 \times 10^{-8}$。

应用（22）式的 Newton-Krylov 方法在计算过程中不需要生成和存储 Jacobian 矩阵，同时计算量也大大减少，这种方法被称为 JFNK（Jacobian-Free Newton-Krylov）方法。

3.2 基于物理机制的预条件

对于大型数值模式而言，在 JFNK 方法迭代过程中 Krylov 子空间的计算和存储需要占用较大的系统内存，其解决途径为尽可能的增加迭代收敛速度。而迭代收敛速度与系数矩阵的特征值有关，特征值分布越集中，收敛速度越快。为此在应用 GMRES 求解（14）式时，需应用预条件 $\boldsymbol{P}$(preconditioner）以加快 GMRES 的收敛。

引入右预条件，(14）式的形式变为

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}^k)\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{P}\delta\boldsymbol{x}^k = -\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k). \tag{24}$$

令 $\boldsymbol{J}' = \boldsymbol{J}\boldsymbol{P}^{-1}$，$\delta\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{P}\delta\boldsymbol{x}$，则有

$$\boldsymbol{J}'(\boldsymbol{x}^k)(\delta\boldsymbol{x}')^k = -\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^k). \tag{25}$$

同样，由上述的 GMRES 方法求解 $\delta\boldsymbol{x}'$。最后计算

$$\delta\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}^{-1}\delta\boldsymbol{x}', \tag{26}$$

得到 $\delta\boldsymbol{x}$，再代入 Newton 迭代。

预条件 $\boldsymbol{P}$ 的选取，在数学上可以通过矩阵的变换，如 ILU 因子分解、区域分解、不完全 Cholesky 分解等等。而在实际物理过程的计算中，可通过物理过程的简化获得基于物理机制的预条件[8, 30]，Knoll[31]应用一阶空间差分作为高阶差分方程的预条件，Mousseau 等[20]在求解全隐式二维浅水方程时将该方程半隐式差分算子作为预条件。本文选择一阶半隐式差分的一维非线性平流方程的算子作为预条件。

一阶半隐式格式差分方程

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + u_j^n \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{1}{2} \cdot \left(\bar{u} \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \bar{u} \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} \right) = 0, \quad j = 1, N+1, \tag{27}$$

根据

$$\delta u_j = u_j^{n+1} - u_j^n, \tag{28}$$

将（27）写成 δ 形式，有

$$\frac{\delta u_j}{\Delta t} + \frac{\bar{u}}{4\Delta x}(\delta u_{j+1} - \delta u_{j-1}) = -r_j, \tag{29}$$

其中，r_j 包括（27）式中上标为 n 时刻的所有项。上式写为向量形式为

$$\boldsymbol{P}\delta\boldsymbol{u} = -\boldsymbol{R}, \tag{30}$$

其中，$\delta\boldsymbol{u}$ 为所有格点上的 δu_j 组成的列向量，而 $\boldsymbol{R}$ 是余差向量，矩阵 $\boldsymbol{P}$ 是常数三对角矩阵，第 j 行为

$$P_j = \left\{ \cdots \quad -\frac{\bar{u}}{4\Delta x} \quad \frac{1}{\Delta t} \quad \frac{\bar{u}}{4\Delta x} \quad \cdots \right\}, \tag{31}$$

由（15）式可知，IM 格式的 Jacobian 矩阵为三对角矩阵，第 j 行为

$$J_j = \left\{ \cdots - \frac{\bar{u} + u_j^{n+1}}{4\Delta x} \quad \frac{1}{\Delta t} + \frac{(u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1})}{4\Delta x} \quad \frac{\bar{u} + u_j^{n+1}}{4\Delta x} \cdots \right\}, \tag{32}$$

其中省略号处数值为零（下同）。

$$P_j = J_j - \left\{ \cdots \quad -\frac{u_j^{n+1}}{4\Delta x} \quad \frac{(u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1})}{4\Delta x} \quad \frac{u_j^{n+1}}{4\Delta x} \quad \cdots \right\}. \tag{33}$$

综上，应用 JFNK 方法求解非线性方程组（12），首先由牛顿迭代得到（14）式，引入预条件得（25）式，用 GMRES 方法求解 $\delta\boldsymbol{x}'$，由（26）式得到 $\delta\boldsymbol{x}$，再代入 Newton 迭代（17）式，进行收敛判断，完成一次迭代循环。重复循环至迭代收敛。

4 模拟结果分析

下面就不同基流 $\bar{u}$ 和不同时间步长 Δt 条件下

讨论 2.2 节中三种差分方案的稳定性及计算精度（同解析解比较）。具体计算方案如下：区域[－1，1]上，空间格点取 $N=32$；时间分辨率 Δt 分别取 $2^{-2}, 2^{-3}, \cdots, 2^{-8}, 2^{-9}$；基本气流 $\bar{u}$ 分别取 0.0、1.0、2.0；相应参数 x_0 的取值为 $-\bar{u}$，以确保突变点位于零点；时间积分由 0.0 至 1.0。

4.1　模拟结果稳定性及计算精度对 Δt 的敏感性

受线性不稳定条件限制，当时间步长较大时显式和半隐式格式无法得到稳定的计算结果，特别是基本气流较大时，而理论上全隐式为无条件稳定。首先给出区间[－1，1]上，三种基流参数情况下，三种格式模拟结果的均方根误差随时间步长的变化图（图 1）。图 1 中曲线中断的部分为计算解溢出（即出现不稳定，无法得到计算解，下同）。可见，模拟结果很好地反映了三种格式的稳定性差异，当时间步长较大时，隐式格式仍具有稳定的解，而其他两种格式无法做到，特别是基本气流较大时，稳定性差异更为明显。此外，隐式格式的模拟精度随时间分辨率的提高有明显提高，而半隐式和显式的精度随时间分辨率的提高无明显变化。当取相同参数模拟时，隐式格式的精度最高，且时间分辨率越高优势越明显，当 $\Delta t=2^{-9}$，$\bar{u}=0.0$ 时，隐式格式精度较显式（半隐式）提高了 0.975 倍，$\bar{u}=2.0$ 时较半隐式提高了 0.428 倍，较显式提高了 0.528 倍。

为更直观起见，我们给出 EX（SI）格式计算解不稳定（$\bar{u}=1.0$，$\Delta t=2^{-4}$）和稳定（$\bar{u}=1.0$，$\Delta t=2^{-7}$）时，三种格式的均方根误差在整个积分过程中的变化曲线（图 2）。可见，当时间分辨率较大时（图 2a），隐式格式在计算求解的稳定性和精确性上都明显高于其他两种格式；当时间分辨率较小时

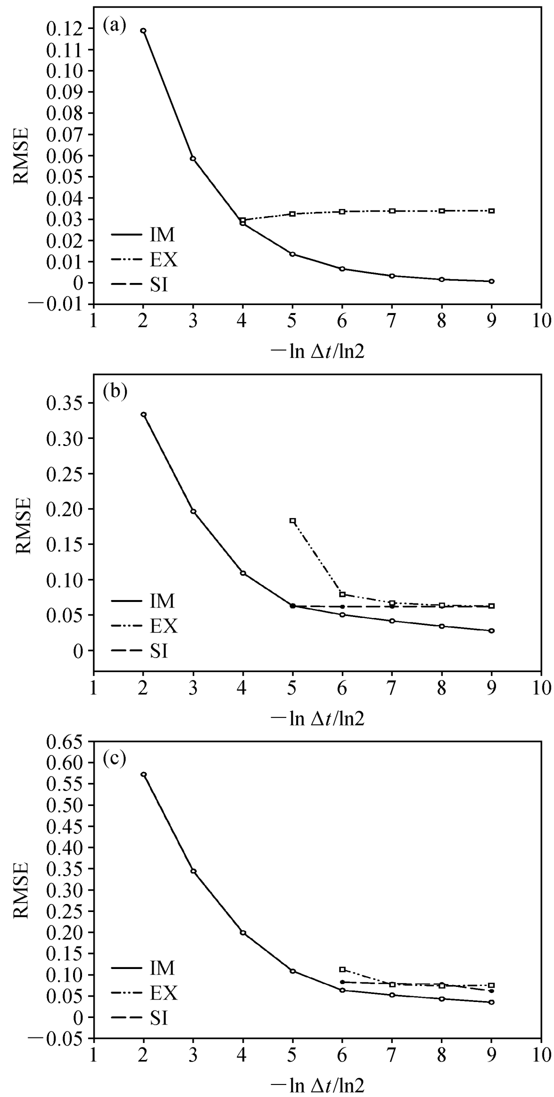

图 1　$t=1$ 时刻三种格式均方根误差：(a) $\bar{u}=0.0$；(b) $\bar{u}=1.0$；(c) $\bar{u}=2.0$

Fig. 1　The root-mean-square error (RMSE) for fully implicit (IM) scheme, explicit (EX) scheme and semi-implicit (SI) scheme at $t=1$: (a) $\bar{u}=0.0$; (b) $\bar{u}=1.0$; (c) $\bar{u}=2.0$

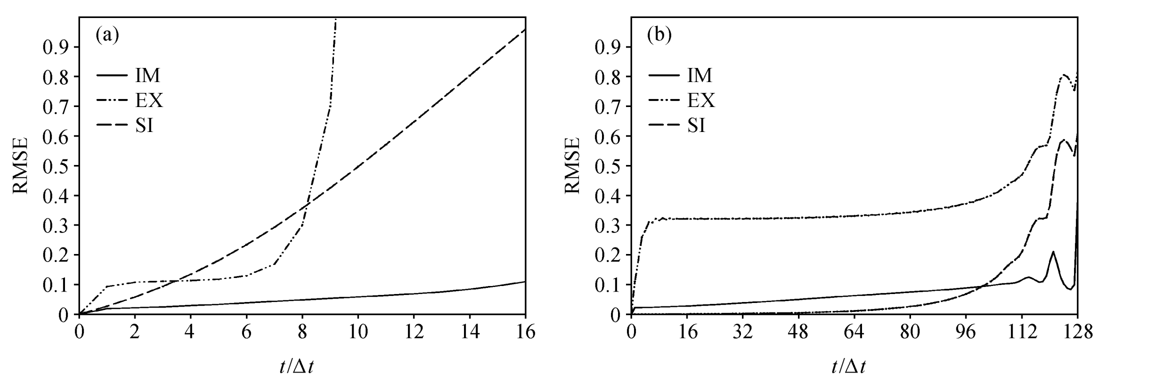

图 2　三种格式的均方根误差在整个积分过程中的变化曲线：(a) $\bar{u}=1.0$，$\Delta t=2^{-4}$；(b) $\bar{u}=1.0$，$\Delta t=2^{-7}$

Fig. 2　The RMSE variation for IM scheme, EX scheme and SI scheme in the whole integral course: (a) $\bar{u}=1.0$, $\Delta t=2^{-4}$; (b) $\bar{u}=1.0$, $\Delta t=2^{-7}$

（图 2b），比较而言 EX 格式的误差依然很大，SI 格式在积分起始阶段误差最小（与取两个时次初值有关），当积分至 $t=0.8$ 左右误差值出现突变，迅速增加，此时 IM 格式的优势得以充分显现。总之，无论时间分辨率如何，IM 格式的计算误差随积分过程的演变都比较平稳。

4.2 模拟结果计算精度对 $\bar{u}$ 的敏感性

由图 1 可见，当 $\Delta t=2^{-6}$ 时，在三种格式都可以得到较为稳定的解，这里以取 $\Delta t=2^{-6}$ 时的模拟结果来分析其对不同 $\bar{u}$ 参数的响应情况。

4.2.1 无基本气流

图 3 给出无基本气流（即 $\bar{u}=0.0$）情况下三种格式的模拟结果。可见隐式格式的模拟效果明显好于其他两个格式，突出表现在突变点两侧。隐式结果在整个积分区间内的连续性与解析解都非常一致，而显式与半隐式的结果在突变点两侧则出现小的扰动，其中显式结果的扰动振幅比半隐式大。

4.2.2 基本气流参数 $\bar{u}=2.0$

当基本气流参数取 $\bar{u}=2.0$ 时（图 4），可以很明显发现，在 $t=1$ 时刻隐式格式结果与解析解相近，且仍比较好地保持了解析解所具有的连续性特征，而显式和半隐式格式在积分过程中在突变点两侧不断地形成扰动，且向上下游频散，表现为在解析解上叠加了一系列扰动，特别是显式格式。这里基本流为正值，可以发现扰动的频散主要为向上游的频散。比较而言，三种格式的模拟效果，隐式最好，半隐式次之，显式的误差最为明显。

比较图 3 和图 4 发现，基本流的存在使得显式和半隐式格式计算结果中突变点附近的扰动出现频散，进而影响到整个计算区域。基本流取其他数值时（图略），显式和半隐式结果同样表现出上述特征，且基本气流越大频散越明显，而隐式结果很好地保持了解析解的特征，受基本气流变化的影响不明显。

4.3 对空间分布梯度较大区域的模拟

在无粘 Burger 方程的解析解中，在 $x=x_0+\bar{u}t$ 处，空间分布梯度很大，出现奇异点（或称突变点）。在实际的大气中有很多气象要素的现象存在，最典型的就是锋面两侧要素的一阶不连续现象。对这些现象的模拟能力也是检验数值模式优劣的一个重要方面，这也是本文采用无粘 Burger 方程作为研究对象的主要原因。

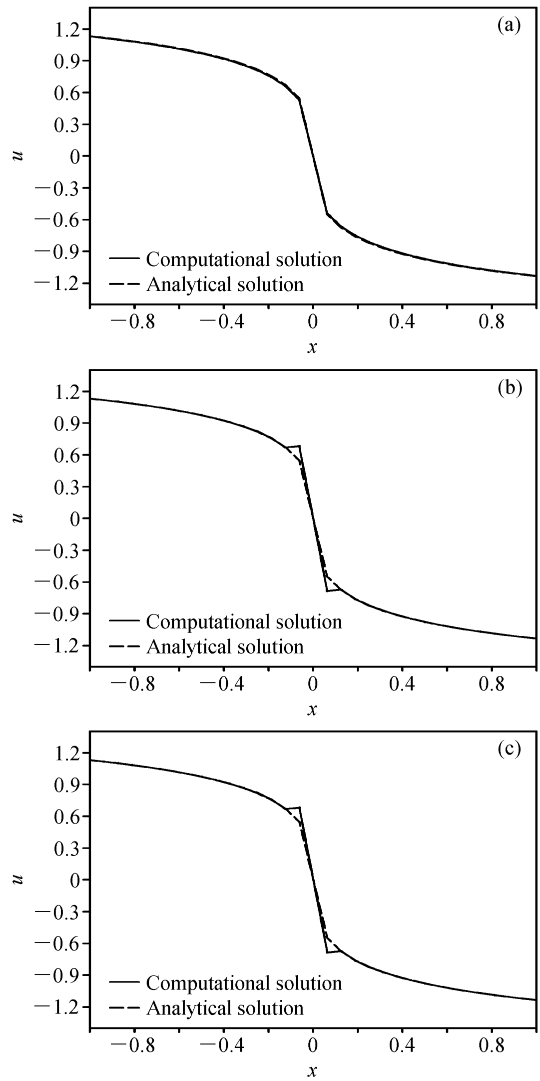

图 3 $t=1$ 时刻三种格式的模拟结果（$\Delta t=2^{-6}$，$\bar{u}=0.0$）：(a) IM 格式；(b) EX 格式；(c) SI 格式。实线为数值解；虚线为解析解

Fig. 3 The simulation results for fully implicit scheme (a), explicit scheme (b) and semi-implicit scheme (c) at $t=1$

由 4.1 节和 4.2 节中的模拟结果可以看出，几种格式模拟结果的最大差异就是出现在奇异点附近，该区域也是模拟误差的主要来源，同时也可以初步看出，隐式格式对空间突变现象的模拟能力明显高于其他两个格式。进一步分析突变点及其两侧共五点这三种格式在的模拟结果均方根误差（图 5），可以清晰地看到隐式格式对要素空间分布具有较大梯度的系统模拟结果更好，且在数值解稳定的条件下随时间分辨率的提高其优势越明显。

另外，本文也对不同空间分辨率下各格式进行

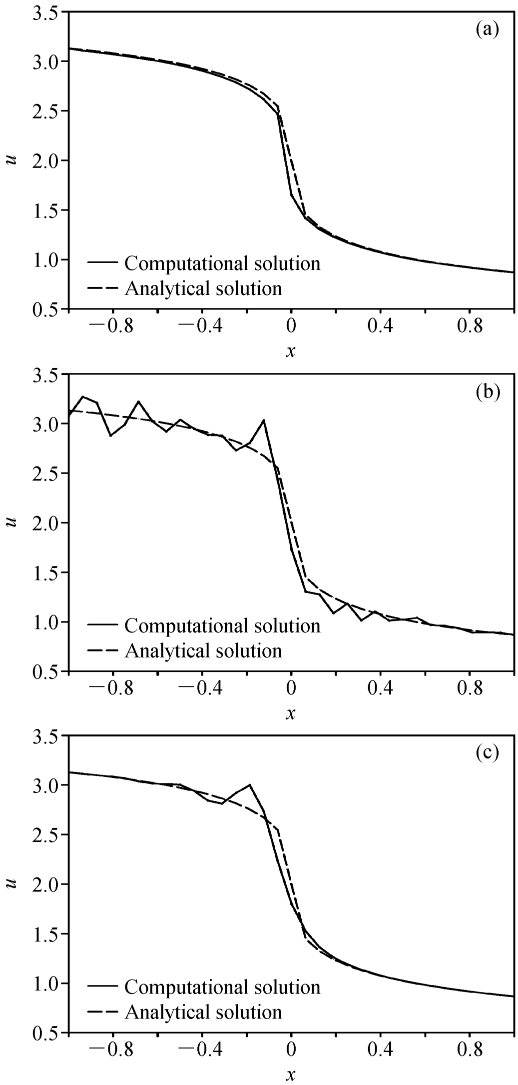

图 4　$t=1$ 时刻三种格式的模拟结果（$\Delta t=2^{-6}$，$\bar{u}=2.0$）：(a) IM 格式；(b) EX 格式；(c) SI 格式。实线为数值解；虚线为解析解

Fig. 4　The simulation results for fully implicit scheme (a), explicit scheme (b) and semi-implicit scheme (c) with $\Delta t=2^{-6}$, $\bar{u}=2.0$ at $t=1$

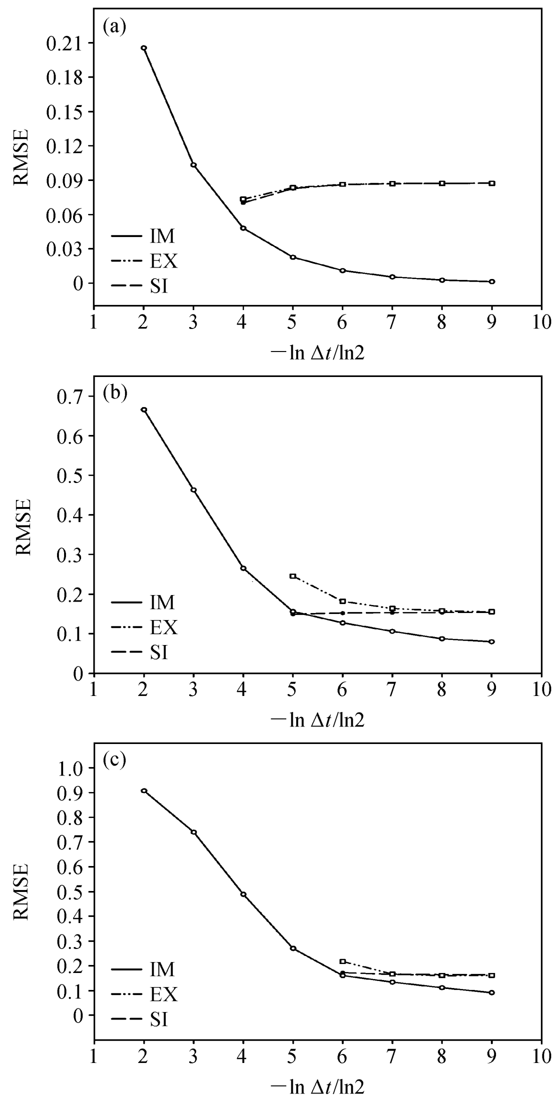

图 5　时刻突变点附近五点的均方根误差：(a) $\bar{u}=0.0$；(b) $\bar{u}=1.0$；(c) $\bar{u}=2.0$

Fig. 5　The RMSE in the scale-collapse area for fully implicit scheme, explicit scheme and semi-implicit scheme at $t=1$: (a) $\bar{u}=0.0$; (b) $\bar{u}=1.0$; (c) $\bar{u}=2.0$

了计算，得到了与上述基本一致的结果，且随空间分辨率的提高，各格式模拟精度均有所提高。以上隐式格式表现出的在稳定性、精确性方面的优越性，很好地解决了半隐式和显式格式在处理高分辨率模式存在的问题。特别是在模拟锋面等空间分布一阶不连续天气系统方面，隐式格式表现出了明显好于其他系统的能力。总之，隐式格式对不同尺度、不同空间特征的系统都具有很好的适应性，是未来更好发展多尺度天气预报模式的需要。

5　结语和讨论

本文以全隐式格式的一维非线性平流方程为例，探讨了 JFNK 方法求解全隐式非线性方程的有效性以及采用全隐式格式计算的必要性。发现该方法很好地解决了全隐式非线性方程的迭代收敛问题，使得进一步应用该方法解决较复杂的全隐式非线性方程成为可能。同时，模拟结果表明，隐式结果与显式和半隐式结果相比具有如下优越性：

（1）当时间步长较大时，隐式格式仍具有稳定

解；时间步长较小时，隐式格式的精度最高。

（2）系统的基本气流越强，隐式格式较其他格式在精度上的绝对优势越明显。

（3）隐式格式对要素空间分布具有较大梯度的系统模拟结果最好，而半隐式和显式的计算解中突变点附近出现不同程度的扰动，并逐渐向上下游频散。

由于本文只是对全隐式格式和 JFNK 方法结合进行初步尝试，因此，在理论及应用方面还有待进一步深入的工作来完善。

附录 Krylov 子空间迭代方法

Krylov 子空间迭代方法是一类非常有效的求解大型线性方程组

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \tag{A1}$$

的投影迭代算法，在 20 世纪 50 年代初期被提出，但直到 1971 年被 Reid[25] 重新提出才得以推广，我国也在理论研究、油藏数值模拟、计算电磁学等方面开展了很多工作。

投影算法就是从 n 维向量空间中找出一个子空间 K，从中寻找近似解，子空间 $\boldsymbol{K}$ 称为搜索空间（右子空间）。如果该子空间维数 $\dim\boldsymbol{K}=m$，则为在 $\boldsymbol{K}$ 中求出一个近似解，需要有 m 个限制条件，通常采用 m 个正交条件。特别地，可以采用残向量 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax}$ 与 m 个线性无关向量正交的条件，这 m 个线性无关向量就定义了另外一个 m 维子空间 $\boldsymbol{L}$，通常称之为限制子空间或左子空间。

Krylov 方法是投影算法，根据左子空间选取的不同可以分为很多种，如 FOM 方法、IOM 方法、DIOM 方法、GMRES 方法等等。本文应用的是 GMRES（广义最小残量）方法。

A.1 Krylov 子空间投影法基本理论

对于大型线性方程组（A1），令其左右空间 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{K}$，分别为

$$\begin{cases} \boldsymbol{L} = \mathrm{span}\{\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \cdots, \boldsymbol{w}_m\} \\ \boldsymbol{K} = \mathrm{span}\{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_m\} \end{cases} \tag{A2}$$

其中，span{ }表示子空间（下同），$\boldsymbol{w}_i, \boldsymbol{v}_i (i=1,2,\cdots,m)$ 是空间中各自线性无关的向量。假设 $\boldsymbol{x}_0$ 为初始迭代值，用投影法寻求这样的一种近似解：

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{z}_m, \boldsymbol{z}_m = \boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y}_m \in \boldsymbol{K} \\ \boldsymbol{r}_m = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}_m = \boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{Az}_0 \perp \boldsymbol{L} \end{cases} \tag{A3}$$

其中，$\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax}_0$。令

$$\boldsymbol{H}_m = \boldsymbol{W}_m^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}_m, \tag{A4}$$

如果矩阵 $\boldsymbol{H}_m$ 满足

$$\det(\boldsymbol{H}_m) \neq 0, \tag{A5}$$

则投影方法有如下形式的解：

$$\boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{V}_m \cdot \boldsymbol{H}_m^{-1} \cdot \boldsymbol{W}_m \cdot \boldsymbol{r}_0, \tag{A6}$$

但是上述公式还无实际用处，因为 $\boldsymbol{V}_m$，$\boldsymbol{W}_m$ 还没有确定，令 $\boldsymbol{K}_m$，$\boldsymbol{L}_m$ 分别为 Krylov 子空间：

$$\boldsymbol{K}_m(\boldsymbol{B},\boldsymbol{r}_0) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{Br}_0, \cdots, \boldsymbol{B}^{m-1}\boldsymbol{r}_0\}, \tag{A7}$$

$$\boldsymbol{L}_m(\boldsymbol{C},\boldsymbol{r}_0) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{Cr}_0, \cdots, \boldsymbol{C}^{m-1}\boldsymbol{r}_0, \} \tag{A8}$$

其中，$\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{C}$ 分别为与 $\boldsymbol{A}$ 有关的矩阵，此时称该方法为 Krylov 子空间投影法。

大多数的 Krylov 子空间投影法都采用以下两种正交化过程构造子空间：通过 Gramm-Schmidt 正交化过程得到 $\boldsymbol{w}_i, \boldsymbol{v}_i (i=1,2,\cdots,m)$，并使得 $\boldsymbol{H}_m$ 为上 Hessenberg 阵，或通过 Lanczos 双正交过程使得 $\boldsymbol{H}_m$ 为三对角阵。

A.2 GMRES 方法

GMRES 算法是对应于取 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{AK}$ 的 Krylov 子空间法，对于给定初值 $\boldsymbol{x}_0$，$\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax}_0$ 为方程的初始残量，取

$$\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}_0}{\theta}, \tag{A9}$$

其中，$\theta=(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0)^{1/2}$。之后再由其出发，利用 Arnodi 方法构筑 $\boldsymbol{K}$ 的一组标准化正交基。Arnodi 方法在计算出一组标准正交基的同时，还使得 Hessenberg 矩阵 $\boldsymbol{H}_m$ 特征值能与 $\boldsymbol{A}$ 的特征值更为近似。

在已知 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_j$ 假设 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_j, \boldsymbol{Av}_j$ 线性无关，则可用这组向量求出一个与 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_j$ 中每个向量都正交的向量，

$$\boldsymbol{w}_j = \boldsymbol{Av}_j - h_{1j}\boldsymbol{v}_1 - h_{2j}\boldsymbol{v}_2 - \cdots h_{jj}\boldsymbol{v}_j. \tag{A10}$$

利用 $(\boldsymbol{w}_j, \boldsymbol{v}_i)=0$ 与 $(\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_l)=0, i\neq l$，可知

$$h_{ij} = (\boldsymbol{Av}_j, \boldsymbol{v}_i), \quad i = 1,2,\cdots,j. \tag{A11}$$

再记

$$h_{j+1,j} = (\boldsymbol{w}_j, \boldsymbol{w}_j)^{1/2}, \tag{A12}$$

就能得到 Eucild 范数等于 1 且与 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_j$ 中的每个向量都正交的向量，

$$\boldsymbol{v}_{j+1} = \frac{\boldsymbol{w}_j}{h_{i+1,j}}. \tag{A13}$$

由以上方法可以得到一组 m 维的正交基，记为 $\boldsymbol{V}_m=[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_m]$。则 GMRES 方法新近似解具有

$$\boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y}_m \tag{A14}$$

的形式，其中 $\boldsymbol{y}_m$ 为待定的 m 维向量，所以

$$\Psi(\boldsymbol{y}) = \| \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_m \|_2 = \| \boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y}_m \|_2 =$$
$$\| \theta\boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y}_m \|_2 = \| \theta\boldsymbol{e}_1 - \bar{\boldsymbol{H}}_m\boldsymbol{y}_m \|_2. \quad (A15)$$

由于 $\boldsymbol{x}_m$ 就是 $\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{K}_m$ 中使得 $\| \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{z} \|_2$ 达到最小的那个 $\boldsymbol{z}$ 向量，所以

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{V}_m\boldsymbol{y}_m \\ \boldsymbol{y}_m = \arg\min \| \theta\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{H}_m\boldsymbol{z} \|_2 \end{cases}. \quad (A16)$$

上式的最小二乘问题可采用 Givens 变换进行计算，这里不再赘述。

参考文献（References）

[1] Sperber K R, Hameed S, Potter G L, et al. Simulation of the northern summer monsoon in the ECMWF model: Sensitivity to horizontal resolution. *Mon. Wea. Rev.*, 1994, **122**: 2461～2481

[2] Baumhefner D P. Numerical extended-range prediction: Forecast skill using a low-resolution climate model. *Mon. Wea. Rev.*, 1996, **124**: 1965～1980

[3] Stephenson D B, Chauvin F, Royer J F. Simulation of the Asian summer monsoon and its dependence on model horizontal resolution. *J. Meteor. Soc. Japan*, 1998, **76** (2): 237～265

[4] Martin G M. The simulation of the Asian summer monsoon, and its sensitivity to horizontal resolution in the UK Meteorological Office Unified Model. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 1999, **125**: 1499～1525

[5] Meehl G A, Zwiers F, Evans J, et al. Trends in extreme weather and climate events: Issues related to modeling extremes in projections of future climate change. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, 2000, **81**: 427～436

[6] 曾庆存，季仲贞. 发展方程的计算稳定性问题. 计算数学，1981，**1**：79～86
Zeng Qingcun, Ji Zhongzhen. On the computational stability of evolution equations. *Mathematics Numerica Sinica* (in Chinese), 1981, **1**: 79～86

[7] 季仲贞，曾庆存. 发展方程差分格式的构造和应用. 大气科学，1982，**6** (1)：88～94
Ji Zhongzhen, Zeng Qingcun. The construction and application of difference schemes of evolution equations. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (*Scientia Atmospherica Sinica*) (in Chinese), 1982, **6** (1): 88～94

[8] Brown P N, Saad Y. Hybrid Krylov methods for nonlinear systems of equations. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 1990, **11**: 450～481

[9] Brown P N, Saad Y. Convergence theory of nonlinear Newton-Krylov algorithms. *SIAM J. Opt.*, 1994, **4**: 297～330

[10] Brown P N. A local convergence theory for combined inexact-Newton/finite-difference projection methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 1987, **24**: 407～434

[11] McHugh P R, Knoll D A. Inexact Newton's method solution to the incompressible Navier Stokes and energy equations using standard and matrix-free implementations. *AIAA J.* 1994, **32**: 2394～2400

[12] Johnson R W, McHugh P R, Knoll D A. High-order scheme implementation using Newton - Krylov solution methods. *Numer. Heat Trans.*, *B Fundam*, 1997, **31**: 295～312

[13] Hovland P D, McInnes L C. Parallel simulation of compressible flow using automatic differentiation and PETSc. *Parallel Comput.*, 2001, **27**: 503～519

[14] Knoll D A, Mousseau V A. On Newton-Krylov multigrid methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 2000, **163**: 262～267

[15] Knoll D A, Rider W J. A multigrid preconditioned Newton-Krylov method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2000, **21**: 691～710

[16] MousseauV A, Knoll D A, Rider W J. A multigrid Newton-Krylov solver for nonlinear systems. In: *Multigrid Methods VI: Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Berlin: Springer, **2000**. 200～206

[17] Pernice M. A hybrid multigrid method for the steady-state incompressible Navier-Stokes equations. *Elec. Trans. Numer. Anal.*, 2000, **10**: 74～91

[18] Mousseau V A, Knoll D A. New physics-based preconditioning of implicit methods for non-equilibrium radiation diffusion. *J. Comput. Phys.*, 2003, **190**: 42～51

[19] Reisner J, Mousseau V A, Knoll D A. Application of the Newton-Krylov method to geophysical flows. *Mon. Wea. Rev.*, 2001, **129**: 2404～2415

[20] Mousseau V A, Knoll D A, Reisner J M. An implicit nonlinearly consistent method for the two-dimensional shallow-water equations with Coriolis force. *Mon. Wea. Rev.*, 2002, **130**: 2611～2625

[21] Reisner J, Wyszogrodzki A, Mousseau V, et al. An efficient physics-based preconditioner for the fully implicit solution of small-scale thermally driven atmospheric flows. *J. Comput. Phys.*, 2003, **189**: 30～44

[22] Kuo H C, Williams R T. Semi-Lagrangian solutions to the inviscid Burgers equation. *Mon. Wea. Rev.*, 1990, **118**: 1278～1288

[23] 王军，陈嘉滨. 完全非内插半拉格朗日格式在一维 Burgers 方程及二维浅水波方程上的应用. 大气科学，2000，**24** (4)：493～508
Wang Jun, Chen Jiabin. An application of noninterpolating semi-Lagrangian scheme to one-dimensional Burgers equation and two-dimensional shallow water equations. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 2000, **24** (4): 493～508

[24] 梁恒，白峰杉. 对称不定问题的不精确 Newton 法. 计算数学，2002，**24** (3)：319～326
Liang Heng, Bai Fengshan. Inexact Newton method for sym-

metric indefinite problems. *Mathematics Numerica Sinica* (in Chinese), 2002, **24** (3): 319～326

[25] Reid J K. On the method of conjugate gradients for the solution of large sparse systems of linear equations. Reid J K, Ed. *Large Sparse Sets of Linear Equations*. New York: Academic Press, 1971. 231～254

[26] Saad Y, Schultz M N. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving non-symmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 1986, **7**: 856～869

[27] Arnoldi W E. The principle of minimized iteration in the solution of the matrix eigenvalue problem. *Quart. Appl. Math.*, 1951, **9**: 17～29

[28] Chan T F, Jackson K R. Nonlinearly preconditioned Krylov subspace methods for discrete Newton algorithms. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 1984, **5**: 533～542

[29] Pernice M, Walker H F. NITSOL: a Newton iterative solver for nonlinear systems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 1998, **19**: 302～318

[30] Knoll D A, Rider W J, Olson G L. An efficient nonlinearsolution method for non-equilibrium radiation diffusion. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1999, **63**: 15～29

[31] Knoll D A. An improved convection scheme applied to recombiningdivertor plasma flows. *J. Comput. Phys.*, 1998, **142**: 473～488