

王鹏飞, 楚苹瓌, 王立志, 等. 2019. Runge-Kutta 算法与 Li 差分法不同阶数配合对计算精度影响研究 [J]. 大气科学, 43 (1): 99–106. Wang Pengfei, Chu Pingxiang, Wang Lizhi, et al. 2019. A study on the precision of Runge-Kutta method with various orders of Li difference scheme [J]. Chinese Journal of Atmospheric Sciences (in Chinese), 43 (1): 99–106, doi:10.3878/j.issn.1006-9895.1805.17238.

# Runge-Kutta 算法与 Li 差分法不同阶数 配合对计算精度影响研究

王鹏飞<sup>1,2</sup> 楚苹瓌<sup>1,3</sup> 王立志<sup>5</sup> 周任君<sup>4</sup> 黄刚<sup>2</sup>

1 中国科学院大气物理研究所季风系统研究中心, 北京 100190

2 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, 北京 100029

3 中国科学院大学, 北京 100049

4 中国科学技术大学地球和空间科学学院, 合肥 230026

5 中国科学院东亚区域气候—环境重点实验室, 北京 100029

**摘 要** 为了充分发挥高阶 Li 空间微分方案 (Li, 2005) 的优点, 实现了时间积分为 2~6 阶 Runge-Kutta (简称 RK) 格式的偏微分方程求解算法 (简称 RKL 算法)。然后通过多组数值试验, 研究了时间积分阶数对计算误差的影响。线性平流方程的试验结果表明对于方波函数型初值, 2、4、5 和 6 阶 RK 算法能获得和 3 阶精度差不多的结果, 而对于高斯函数型的初值, 高阶 RKL 算法可以取得较好的计算效果。RK 为 5 (6) 阶时, 对应的 Li 微分阶数可达 9 (10) 阶, 总误差控制在  $10^{-7}$  ( $10^{-8}$ ) 以内。随 RK 阶数增加 Li 微分有效阶数有增加的趋势, 而总误差在逐渐减小。计算非线性无粘 Burgers 方程时, RKL 算法能否获得好的计算结果, 除了受初始场形式的影响, 还与计算的目标时刻有关。当目标时刻解的各阶导数连续 (且未出现无穷大数值时), 高阶 (RK 为 4~6 阶) 算法是有效的; 若出现了导数间断、或导数为无穷大, 就会碰到冲击波解类型的问题, 此时高阶 RK 算法也无法获得很高精度的数值解。此非线性的算例中, Li 微分阶数仍然随 RK 阶数增加而增加, 但增加的趋势不是线性的, 具体变化关系可以通过实验结果拟合而获得。研究发现时间积分方案阶数大于 3 之后, 对应的最优空间差分精度阶数可以比 6 阶提高很多, 这再次证明了以前研究中 6 阶以上空间差分格式对结果无改进的现象, 是由于没有使用足够高精度的时间积分方案引起的。相比于 Taylor-Li (Wang, 2017) 算法, 5~6 阶的 RK 方法编程和实现简单, 计算结果的精度比 3 阶算法要提高很多, 因此, 它是一种能够对复杂方程适用的简易高阶算法方案, 具有一定的实用价值。

**关键词** Runge-Kutta-Li 格式 高阶算法 Burgers 方程

文章编号 1006-9895(2019)01-0099-08

中图分类号 P435

文献标识码 A

doi:10.3878/j.issn.1006-9895.1805.17238

## A Study on the Precision of Runge-Kutta Method with Various Orders of Li Difference Scheme

WANG Pengfei<sup>1,2</sup>, CHU Pingxiang<sup>1,3</sup>, WANG Lizhi<sup>5</sup>, ZHOU Renjun<sup>4</sup>, and HUANG Gang<sup>2</sup>

1 Center for Monsoon System Research, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190

2 State Key Laboratory of Numerical Modeling for Atmospheric Sciences and Geophysical Fluid Dynamics (LASG), Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029

3 University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049

收稿日期 2017-09-16; 网络预出版日期 2018-07-02

作者简介 王鹏飞, 男, 1973 年生, 博士, 高级工程师, 主要从事数值分析、并行计算、非线性可预报性等方面的研究。E-mail: wpf@mail.iap.ac.cn

资助项目 国家自然科学基金项目 41530426、41375112, 中国科学院“关键技术人才”项目

Funded by National Natural Science Foundation of China (Grants 41530426, 41375112), the Key Technology Talent Program of Chinese Academy of Sciences

4 School of Earth and Space Sciences (SESS), University of Science and Technology of China, Hefei 230016

5 Key Laboratory of Regional Climate-Environment for Temperate East Asia (TEA), Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029

**Abstract** We implement the hybrid Runge-Kutta-Li (RKL) scheme for the purpose to take full advantage of Li's high order spatial differential method (Li, 2005). A set of numerical experiments has been conducted to analyze how the computation error is affected by the order of integration scheme. The results of the linear advection equation indicate that with the square-wave type initial values, the scheme can only obtain a third-order accuracy. However, for the Gaussian function type of initial values, the scheme can obtain a better result. The fifth (sixth) order Runge-Kutta (RK) integration scheme corresponds to 9th (10th) order Li's difference scheme in spatial direction and the total error can be controlled within  $10^{-7}$  ( $10^{-8}$ ). The order of Li's scheme tends to increase while the RK order increases, and the total error gradually decreases. When we compute the nonlinear Burgers' equation, whether the RKL scheme can obtain good results is not only dependent on the form of the initial field, but also related to the target computation time. When the derivative is continuous (and infinite value does not appear) at the target observation time, 4th–6th order RKL scheme is effective. On the contrary, if the derivative is discontinuous, or the derivative tends to infinity, the RKL scheme cannot obtain high-precision numerical solution. In this case (Burgers' with smooth initial), the order of Li's scheme still increases while the RK order increases, but the relation between them shows a nonlinear tendency (which can be specified through some fitting methods). The results indicate that when the order of time integral is more than three, the corresponding optimal spatial difference order can be higher than six. This result confirms the finding of previous studies that the order of spatial difference above six makes no improvement to the results due to the lack of high-precision time integral scheme. Compared with Taylor-Li (Wang, 2017) scheme, the 5th–6th order RKL scheme is easier to program and can yield more precise results than the third-order scheme. To conclude, the high order RKL scheme can be applied to some complicated types of partial differential equations and is valuable for many other similar computation cases.

**Keywords** Runge-Kutta-Li scheme, High-order, Burgers' equation

## 1 引言

数值模式和数值模拟是定量研究天气和气候变化的主要工具，但是由于数学模型中各变量之间复杂的非线性作用关系，导致模拟结果中存在着不确定性。政府间气候变化专门委员会报告中明确指出正确分析模式的不确定性是 IPCC 报告的主要任务之一 (Mastrandrea et al., 2010)。这些不确定性的来源既包含物理参数的选取、模式的框架和观测的误差，也包括了计算误差的影响 (Von Neumann and Goldstine, 1947)。计算误差对数值模拟结果的影响可以从复杂的大气环流模式 (王鹏飞等, 2007)、耦合模式 (陈显尧等, 2008) 运行结果看出，也可以从简单的混沌动力系统 (Li et al., 2000; Liao, 2009; Wang et al., 2014)、准地转模式 (Teixeira et al., 2007) 的数值试验得到验证。因此，如何采取有效的方法来控制计算误差的增长，对长时间的数值计算和精确的数值模拟至关重要。

大气和海洋流体力学模式中有许多形如  $\frac{\partial F}{\partial t} = \mathbf{L}F$  的发展方程，其中  $\mathbf{L}$  为包含  $F$  以及  $F$  关于空间变量导数的算子，使用数值模式求解这类方程

组时，计算误差的大小主要取决于空间和时间方向的算法精度。空间导数的精确计算已经有过许多研究，早期人们认为 2 阶的空间差分格式已经可以满足使用上的要求，随着研究的深入，逐渐认识到直接模拟湍流等复杂流动，高阶的算法是必要的 (Lele, 1992)，已经有许多研究者使用高精度算法成功的模拟了复杂流体的运动 (Lele, 1992; Ma and Fu, 1996)。但在时间积分方案的选取中多采用较低的阶数 (3 阶左右; 季仲贞和王斌, 1994)，这就导致了一些模式计算中空间、时间计算精度不匹配，进而影响了模式长时间计算的准确性。尤其是，Tal-Ezer (1986, 1989)、吴声昌和刘小清 (1996) 等研究表明，只有整体提高算法的阶数，才能使数值模拟中的总误差得到控制，因此，有必要研究适用于大气科学数值模式的时—空匹配的高阶算法，以减小天气和气候数值模拟中由于计算误差导致的不确定性。

使用数值方法求解依赖于时间的常微分方程组或偏微分方程组时，主要是进行空间差分和时间积分两类计算。减小差分方法空间计算误差的途径有加大算法阶数和减小网格尺度两种，但是对于三维的复杂流体力学系统，算法阶数的增加往往是困

难的。而网格尺度减小一半时,往往意味着计算量以 $2^4$ 方式增加。在大气科学领域前人也进行了高阶算法的研究(季仲贞和王斌,1994),高阶的差分格式往往存在一个问题,当计算精度提高了,其计算稳定性就降低了,季仲贞等(1999)使用守恒型的差分格式的办法,在计算精度和稳定性两方面取得了较好的平衡。高阶的空间差分算法有很多种实现,如紧致差分格式(Lele, 1992; Ma and Fu, 1996)已有一些应用。Li(2005)提出了一种空间导数的高阶计算方法,它的优点是采用显式计算,实现简单,而且省时,可以很方便的获得10阶甚至更高的阶数。冯涛和李建平(2007)利用此方法研究了一维平流方程、无粘 Burgers 方程(Hopf, 1950)、正压涡度方程的高精度差分格式,发现6阶空间差分算法的计算效果最好,而且增加的计算量并不多。但随着阶数的进一步增加,从7阶到10阶,计算结果改进的效果不明显,而且7阶以上的差分格式计算结果反而有变差的趋势。

减小时间积分计算误差也有两个途径:减小计算的时间步长和加大算法的阶数。缩小计算所用的时间步长是减小时间积分中误差的最简单方法, Li et al. (2000) 和 Teixeira et al. (2007) 都对此做了研究,他们发现了计算结果对时间步长的敏感性。特别是获得混沌系统长时间数值解的方法不仅依赖于计算的步长,还与算法阶数和浮点计算精度有关。此外,还受制于实际消耗的计算时间, Wang et al. (2012) 比较了4阶 Runge-Kutta (RK) 方法(简称 RK4) 和 Taylor 高阶算法在计算时间上的花费,结果表明:高阶算法能够将求解 Lorenz 方程花费的墙钟时间指数型的降低,高阶算法比使用最优步长计算的低阶算法更具效率。

上述分析表明通过增加算法阶数来减小时间积分时的计算误差是非常必要的。虽然冯涛和李建平(2007)利用 Li(2005)方法进行了大量数值试验研究,但是他们的研究中存在两个问题,一是他们只在空间方向上使用了较高阶的算法,而时间积分上只采用了3阶左右的 RK 法,有可能使计算结果中的误差主要受时间积分误差的影响,从而导致算法不能取得更好的计算结果;二是求解时选取的初值出现不连续空间导数或出现空间导数无穷大等使用差分方法无法适用的问题,因而导致高阶精度算法无法获得比低阶精度算法更好的计算结果,这并不表示高阶精度算法对那些空间导数处处连

续且有限的问题也无法提高计算的精度。

为了解决这些问题, Wang (2017) 给出一类发展型偏微分方程的高阶 Taylor-Li 计算方案(简称 TLW),它的特点是可以调节时间积分方案的阶数,完成从3阶到30阶甚至更高阶数的算法。Wang (2017) 发现时间积分方案的阶数大于3之后,对应的最优空间差分精度阶数可以比6阶提高很多,这就解释了冯涛和李建平(2007)研究中6阶以上空间差分格式对结果无改进的现象,是由于没有使用足够高精度的时间积分方案引起的。

Wang (2017) 的研究表明:当算法的时间积分阶数达到5时,一维线性平流方程的算例中相匹配的空间差分阶数为10阶,误差为 $10^{-6}$ 量级。而无粘 Burgers 的算例,与5阶时间积分相匹配的空间差分阶数为16阶,误差为 $10^{-14}$ 量级。因而,对于一些需要高精度,但又不要求极致的高精度解时,5、6阶的时间积分方案就够用了。相比于 Taylor-Li 算法,6阶以内的 RK 方法编程实现要简单,因此,本文将冯涛和李建平(2007)所用的 RK3 算法,改进为2~6阶可调的 RK 方法,配合 Li 高阶微分公式形成 Runge-Kutta-Li (简称 RKL) 算法。通过多组数值试验,研究 RKL 方法中时间积分阶数对计算误差的影响,评估总体的计算性能,以期找到一种能够对复杂方程适用的简易高阶算法方案,当使用 Taylor-Li 算法编程代价过高时,替代 Taylor-Li 算法进行偏微分方程的高精度计算。

## 2 RK 方法与 Li 空间差分算法联合的 RKL 算法

### 2.1 2~6 阶 RK 与 Li 联合算法

一维平流方程的形式为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

其中,  $u$  为平流变量,可以用一个任意高阶精度的算法来求解。RK 方法是一个经典的算法,常被用于求解常微分方程 (ODEs), 许多文献都对此方法如何微分方程系统进行了介绍 (Hairer et al., 2000; Butcher, 2008)。

2 阶 RK 方法如下:

$$\begin{cases} Z_1 = z^n, \\ Z_2 = z^n + \frac{1}{2} \tau f(Z_1), \\ Z^{n+1} = z^n + \tau f(Z_2), \end{cases} \quad (2)$$

3 阶 RK 方法 (Heun 方法) 如下:

$$\begin{cases} Z_1 = z^n, \\ Z_2 = z^n + \frac{1}{3}\tau f(Z_1), \\ Z_3 = z^n + \frac{2}{3}\tau f(Z_2), \\ Z^{n+1} = z^n + \frac{1}{4}\tau f(Z_1) + \frac{3}{4}\tau f(Z_3), \end{cases} \quad (3)$$

4 阶 RK 方法如下:

$$\begin{cases} Z_1 = z^n, \\ Z_2 = z^n + \frac{1}{2}\tau f(Z_1), \\ Z_3 = z^n + \frac{1}{2}\tau f(Z_2), \\ Z_4 = z^n + \tau f(Z_3), \\ Z^{n+1} = z^n + \frac{1}{6}\tau [f(Z_1) + 2f(Z_2) + 2f(Z_3) + f(Z_4)]. \end{cases} \quad (4)$$

当 RK 算法阶数提升时, 计算步数增加, 方程的个数也增加明显, 为了简便书写, 可将其写为系数表的形式, 例如 RK4 写成系数表的形式为

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \quad (5)$$

其中, 第 1 行表示:  $Z_1 = z^n$ ; 第 2 行表示:  $Z_2 = z^n + \frac{1}{2}\tau f(Z_1)$ , 竖线右侧的第 1 列 ( $\frac{1}{2}$ ) 为  $\tau f(Z_1)$  的系数; 第 3 行表示:  $Z_3 = z^n + \frac{1}{2}\tau f(Z_2)$ , 竖线右侧的第 1 和第 2 列 ( $0, \frac{1}{2}$ ) 分别为  $\tau f(Z_1)$ 、 $\tau f(Z_2)$  的系数; 第 4 行表示:  $Z_4 = z^n + \tau f(Z_3)$ , 竖线右侧的第 1、2、3 列 ( $0, 0, 1$ ) 分别为  $\tau f(Z_1)$ 、 $\tau f(Z_2)$ 、 $\tau f(Z_3)$  的系数; 依此类推。第 5 行 (横线下) 表示:  $Z^{n+1} = z^n + \frac{1}{6}\tau [f(Z_1) + 2f(Z_2) + 2f(Z_3) + f(Z_4)]$ , 横线下为计算下一步数值  $Z^{n+1}$ , 横线上的计算均为临时变量值。

5 阶 RK 方法如下 (Butcher, 2008; 这里仅给出系数):

$$\begin{array}{c|ccccc} 0 & & & & & \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & & & & \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & & \\ \frac{3}{4} & \frac{3}{16} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{9}{16} & \\ 1 & -\frac{3}{7} & \frac{8}{7} & \frac{6}{7} & -\frac{12}{7} & \frac{8}{7} \\ \hline & \frac{7}{90} & 0 & \frac{32}{90} & \frac{12}{90} & \frac{32}{90} & \frac{7}{90} \end{array} \quad (6)$$

6 阶 RK 方法如下 (Butcher, 2008; 这里仅给出系数):

$$\begin{array}{c|cccccc} 0 & & & & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & & & & \\ \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{12} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{12} & & & \\ \frac{5}{6} & \frac{25}{48} & \frac{55}{44} & \frac{35}{48} & \frac{15}{8} & & \\ \frac{1}{6} & \frac{3}{20} & -\frac{11}{24} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{2} & \frac{1}{10} & \\ 1 & -\frac{261}{260} & \frac{33}{13} & \frac{43}{156} & -\frac{118}{39} & \frac{32}{195} & \frac{80}{39} \\ \hline & \frac{13}{200} & 0 & \frac{11}{40} & \frac{11}{40} & \frac{4}{25} & \frac{4}{25} & \frac{13}{200} \end{array} \quad (7)$$

需要注意的是, 3 阶以上的 RK 方法, 系数形式并不唯一, 这里选用了其中一种常用的形式。空间方向采用任意阶精度的 Li 算法 (Li, 2005), 计算公式为

$$f_y^{(m)}(y_i) = \frac{1}{h^m} \sum_{j=0}^n d_{n+1,i,j}^{(m)} f(y_j), \quad (8)$$

其中,  $d_{n+1,i,j}^{(m)}$  的含义和计算方法参考 Li (2005), 本文选  $m=1$ , 因此,  $n$  阶精度需要  $(n+1)$  个点即可; 需要注意的是, 此公式中的  $y_i$  位置为其在从 0 到  $n$  个计算点之间的相对位置, 而不是  $u(x_i)$  中实际网格的绝对位置; 此公式的精度为  $(n-m+1)$  阶。

当  $x$  方向使用  $N$  个网格点时,  $\frac{\partial}{\partial x}(u)$  可以使用公式 (8) 计算, 且能保证其达到  $n$  阶精度, 使用  $n$

+1 个格点 ( $n+1$  为从  $N$  个网格点中选取出的格点数,  $n \leq N-1$ )。例如计算  $x_i$  点时, 如果  $n+1$  为奇数, 这  $n+1$  个格点可选为  $(x_{i-n/2}, \dots, x_i, \dots, x_{i+n/2})$  ( $x_{i-n/2}$  对应  $y_0, \dots, x_i$  对应  $y_{n/2}, \dots, x_{i+n/2}$  对应  $y_n$ ), 使  $x_i$  位于中间点; 如果  $n+1$  为偶数, 这  $n$  个格点可选为  $(x_{i-(n+1)/2}, \dots, x_i, \dots, x_{i+(n+1)/2-1})$ , 使  $x_i$  尽量靠近中间点; 如果  $x_i$  靠近格点的左边界或右边界, 而无法将其放于中心位置时, 可以选取在左侧或右侧边界上能够覆盖  $x_i$  的连续  $n$  个格点即可。对于能使用周期边界条件而避免边界效应的方程, 应尽量选取周期边界条件, 这样可以保证  $x_i$  尽量靠近计算的中间点。

当  $m \equiv 1$  时, 空间方向 1 阶导数的计算公式为

$$f_y^{(1)}(y_i) = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^n d_{n+1,i,j}^{(1)} f(y_j). \quad (9)$$

计算时, 空间导数的精度为  $n$  阶精度, 为了保证空间导数能达到一定的精度, 至少要求使用  $(n+1)$  个格点。例如取  $N=64$ , 若  $n=5$  阶, 则每次计算导数时需要 6 个格点, 依此类推。具体的计算公式如下:

$$d_{2,0,1}^{(1)} = 1, \quad d_{2,1,0}^{(1)} = -1, \quad (10)$$

$$d_{n+1,i,j}^{(1)} = \frac{(-1)^{(i-j)} a_{n-1,i,j}^{(0)}}{j!(n-j)!}, \quad (\text{当 } i \neq j) \quad (11)$$

$$d_{n+1,i,i}^{(1)} = - \sum_{j=0, j \neq i}^n d_{n+1,i,j}^{(1)}, \quad (\text{当 } i = j) \quad (12)$$

$$\begin{aligned} a_{n-1,i,j}^{(0)} &= a_0(-i, \dots, k-i, \dots, n-i), (k \neq i, k \neq j) \\ &= (-i) \cdot (\dots) \cdot (k-i) \cdot (\dots) \cdot (n-i), (k \neq i, k \neq j) \end{aligned} \quad (13)$$

存储空间的安排为  $d[m][n][i][j]$ , 由于  $m \equiv 1$ , 所以可以减少一维, 变为  $d^{(1)}[n][i][j]$ , 一般  $n$  与所需的时间精度  $M$  有关, 一旦  $n$  选定, 可以将存储空间变为二维数组  $d_{n+1}^{(1)}[i][j]$ , 最大需要  $(n+1) \times (n+1)$  的内存数组空间。

求解时每步中逐个格点先计算空间差, 后使用 RK 法得到下一时刻的数值, 全部格点计算完毕进入下一步积分, 直到目标时刻, 此即 RKL 方法对一维线性平流方程的求解过程。

## 2.2 RKL 算法的多精度实现

高阶算法在计算时还会碰到一个问题就是舍入误差, 因为计算所用的时空精度阶数都可能超过 10 阶, Wang (2017) 试验中, 解的数值量级为  $O(1)$ , 如果仅采用双精度计算, 会发现高阶算法的绝对误

差有时徘徊在  $10^{-15}$ , 这恰好是双精度计算时的相对误差极限, 所以为了观察超高阶算法的计算效果, 采用多精度 (Multiple-Precision, 简称 MP) 计算是必要的。本文使用了 MP 库, 采用 1024 二进制位精度, 相当于 200 位以上的十进制有效数字, 足以区分绝对误差小到  $10^{-200}$  的数值解。需注意 MP 版的程序比对应的使用双精度的程序慢约 100 倍左右, 但仍可以较快的完成计算, 相比于计算精度的极大提升, 这些计算速度的减低是可以接受的, 而且有并行计算的办法使之提升 (Wang et al., 2014)。

## 3 RKL 方法的线性平流试验

试验 1: 求解平流方程公式 (1), 使用 Gauss 波初始条件:  $u(x)|_{t=0} = e^{-400(x-0.5)^2}$ 。

仿照 (Takacs, 1985) 的做法, 定义总误差为

$$E = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_D - u_T)^2}, \quad \text{其中 } u_D \text{ 表示数值解, } u_T \text{ 表}$$

示理论解,  $N$  为  $x$  方向的格点数, 这里我们对平均误差方差取了根号, 以保证总误差和原变量具有同样的量纲。

计算时  $x$  方向的空间步长为  $h=1/200$ , 时间步长为  $\tau=1/400$ , 计算区域为  $[0, 1]$ , 计算 400 步, 试验结果如图 1b, 从图 1b 可见, 在 RK 算法阶数为 2 时, 计算误差较大, 而且即使空间差分阶数提升, 误差也无明显变化; 若  $M=3$  阶,  $n$  达到 6 阶时, 计算误差与  $n$  大于 6 阶时的计算误差相差不多;  $M=4$  阶时,  $n$  达到 7 阶左右计算误差接近平缓变化;  $M=5$  阶时,  $n$  达到 9 阶左右计算误差接近平缓变化;  $M=6$  阶时,  $n$  达到 10 阶之后计算误差接近平缓变化。这些结果说明, 本试验中总计算误差受时间积分精度的影响较大, 当时间方向精度大于 3 阶时, 空间方向的格式精度可以超过 6 阶, 这与使用 Taylor-Li 方法 (Wang, 2017) 的结果一致。

对方波型初值也进行了试验[图略, 与 Wang (2017) 的图 1 相似], 高阶精度 (时间方向) 算法只能获得和 3 阶精度差不多的结果。而对于光滑的初值 (图 1), 高阶 RK 算法可以取得较好的计算效果, 基本上随着 RK 算法阶数的提升, Li 微分方案对应的有效阶数也在加大, 总误差在逐渐减小。产生这种差别的原因是方波型初值不连续, 导致  $x$  方向各阶导数也不连续, 使计算效果变差; 而光滑型初值所对应的解各阶导数均存在且连续, 因此可

以获得较好的结果。

#### 4 RKL 方法的无粘 Burgers 方程试验

作为非线性问题的示例, 分析一维无粘性 Burgers 方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (14)$$

理论解的形式: 如果初始场为  $u(x, 0) = f(x)$ , 那么

$$u(x, t) = f(x - u(x, t)t), \quad (15)$$

一定是方程 (14) 的解, 这可以通过如下关系式得

到: 
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial f(x - u(x, t)t)}{\partial t} = f' \left( -u - t \frac{\partial u}{\partial t} \right), \text{ 即}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{-uf'}{1 + tf'}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial f(x - u(x, t)t)}{\partial x} = f' \left( 1 - t \frac{\partial u}{\partial x} \right), \text{ 即}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{f'}{1 + tf'}. \quad (17)$$

将方程 (16) 和 (17) 代入方程 (14), 可见等式成立。方程 (16) 和 (17) 可以用于检验程序中一阶数值微分的精确性, 而通过公式 (15), 使用隐函数求解的办法, 可以得到任意时刻的理论解, 以对数值解进行评估。

试验 2: 求解无粘性 Burgers 方程  $\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ ,

初始条件为:  $u(x, 0) = -\sin(x)$ 。

试验时, 计算区域选为  $[-\pi, \pi]$ , 网格数  $N=800$ , 时间步长为  $\tau=0.001$ , 侧边界条件为周期边界条件。计算时进行检验计算误差的时刻选为:  $t=0.8$ , 共计算 800 步。

图 2 给出了试验 2 的结果, 由于计算时绝对误差会小于  $10^{-15}$ , 因此试验使用的是多精度的程序。从图 2c 可以看出, 在 RK 算法阶数为 2 时, 计算误差较大, 而且即使空间差分阶数提升, 误差也无明显变化; 当时间精度为 3 阶时, 计算误差在空间精度达到 6 阶后就基本保持不变了; 当时间精度为 4、5、6 阶时, 有效的空间差分精度阶数分别可达 12、25、40。这个试验说明了对非线性 Burgers 方程, 只要时间积分精度阶数足够高, 空间方向的差分精度阶数可以超过 6 阶。

对另外一组初值  $u(x, 0) = -\arctan(x)$  也进行了试验[图略, 与 Wang (2017) 的图 4 相似], 高阶精

度(时间方向)算法只能获得和三阶精度差不多的结果。

综上所述, 对于非线性无粘 Burgers 方程, 高阶精度算法能否获得好的计算结果, 除了受初值场分布形势的影响, 还与计算的目标时刻有联系。当解的各阶导数连续且未出现  $\infty$  数值时, 高阶精度的算法是有效的; 若出现了导数间断、或导数为  $\infty$ , 就会碰到冲击波这样的问题, 此时高阶精度的算法也无法获得很精确的数值解。

值得一提的是, 若数值解能够具有周期边界条件, 求解精度会比非周期边界条件的高, 这主要是周期边界条件满足时, 总可以将目标格点放置于差分公式中的中点附近, 计算时误差小。而非周期的边界条件, 在边界点以及紧靠边界点处, 即使能够用  $n$  阶精度的差分格式, 目标格点也会被放置于偏离  $n$  个差分点中心的位置, 实际计算表明这些位置的差分精度较差。

#### 5 结论

本文利用 Li 提出的高阶显式微分公式, 结合 Runge-Kutta 时间积分方案, 实现了求解含时偏微分方程的 Runge-Kutta-Li 高阶算法格式。对一维平流方程, 通过比较理论解和各阶计算格式的数值解, 研究了计算误差随时间积分阶数的变化情况。结果表明: 对于一些光滑、周期边界条件的初值, 如果时间方向的积分精度为 3 阶, 计算误差在空间差分阶数到达 6 阶后减小的不明显。而当时间积分的阶数大于 3, 例如选为 4、5、6 阶时, 此时空间差分阶数超过 6 之后, 计算误差仍有减小的趋势, 相应的有效空间差分阶数可以超过 6 阶, 说明了冯涛等所发现的计算误差在空间差分精度达到 6 阶出现饱和的现象是由于没有足够高的时间积分方案配合而引起的。对于方波这样的初值, 本文计算结果与以前的研究一致。

对非线性的 Burgers 方程, 一个光滑的且满足周期边界条件的算例表明, Runge-Kutta-Li 格式能够取得较好的计算效果。相比于冯涛和李建平 (2007) 使用的 3 阶时间积分方案, 本文实现了 2~6 阶的 RK 时间积分算法, 而相应的空间差分精度也能从 6 阶拓展到 30 阶以上, 因而计算精度也极大提升。

虽然可以通过减小时间步长来改进时间积分的精度, 但是它的效率不如增加阶数高, 这在以往

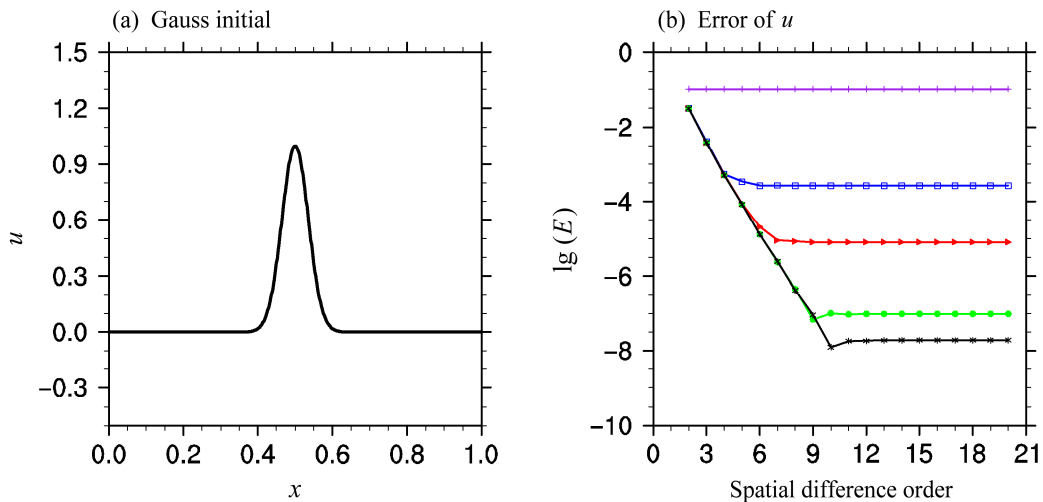


图1 RKL (Runge-Kutta-Li) 方法的线性平流试验: (a) Gauss 波初始场; (b) 计算误差随空间精度阶数的变化。(b) 中横坐标为空间精度阶数, 纵坐标为误差取对数 ( $\log_{10}$ ), 粉、蓝、红、绿、黑色分别代表时间精度为 2、3、4、5、6 阶

Fig. 1 The experiments of linear advection equation by RKL (Runge-Kutta-Li) method: (a) Gaussian-type initial condition; (b) error versus spatial difference order. In (b), the abscissa is the spatial difference order, the ordinate is the logarithm of the error ( $\log_{10}$ ), and the purple, blue, red, green and black curves denote the second-order, third-order, fourth-order, fifth-order and sixth-order time-integration schemes, respectively

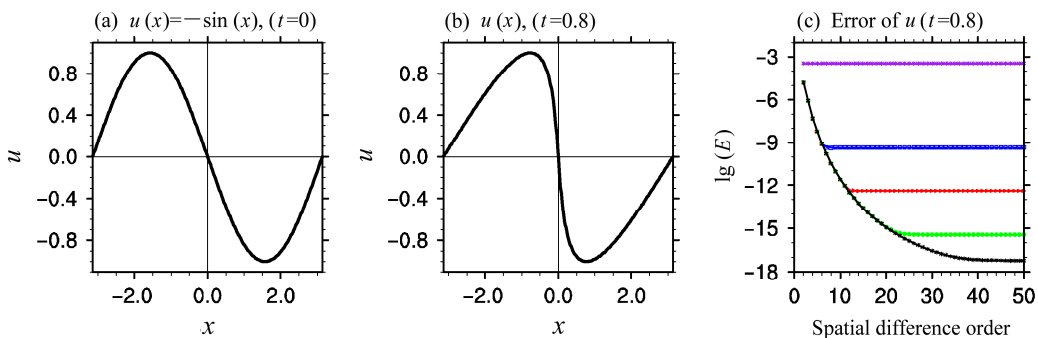


图2 RKL 方法的无粘性 Burgers 方程试验: (a)  $t=0$  时的初始场; (b)  $t=0.8$  时  $u$  的理论解; (c) 计算误差随空间精度阶数的变化。(c) 中横坐标为空间精度阶数, 纵坐标为误差取对数 ( $\log_{10}$ ), 粉、蓝、红、绿、黑色分别代表时间精度为 2、3、4、5、6 阶

Fig. 2 The experiments of the nonlinear Burgers' equation by RKL method: (a) Initial  $u$  at  $t=0$ ; (b) analytical solution of  $u$  at  $t=0.8$ ; (c) error versus spatial difference order. In (c), the abscissa is the spatial difference order and the ordinate is the logarithm of error ( $\log_{10}$ ); purple, blue, red, green and black curves correspond to the second-order, third-order, fourth-order, fifth-order and sixth-order time-integration schemes, respectively

的研究中已经被论证 (Wang et al., 2012)。因此, 相比于以往的仅增加空间差分精度的高阶算法, 本文在时空两个方向提高算法的精度阶数, 减少了总体计算误差。为了控制高阶算法计算过程中浮点舍入误差的影响, 使用多精度计算的工具体, 实现了可以求解平流方程和 Burgers 方程的 RKL 格式, 此方法可以方便的拓展到其它类似方程的求解中。

本文实现的 RKL 算法程序可以灵活的指定时间积分阶数 (2~6 阶)、空间计算的阶数, 还能够方便的调整空间格距、时间积分的步长, 因此适用于研究算法阶数、时空步长和计算误差之间的复杂关系。本研究仅用到最高 6 阶 RK 方法, 对

于 6 阶以上的 RK 方法, 实现较为复杂, 特别是 RK 方法中的系数计算公式, 若用到 MP 库计算则必须为完全准确的 (即不能查算好的系数表, 要在程序里自己算), 因而会增加程序实现的困难, 有兴趣的研究者可以仿照本文方法, 进行更高阶数的试验。

## 参考文献 (References)

- Butcher J C. 2008. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations [M]. 2nd ed. England: John Wiley & Sons, 463pp.  
 陈显尧, 宋振亚, 赵伟, 等. 2008. 气候模式系统模拟结果的不确定性分析 [J]. 海洋科学进展, 26 (2): 119-125. Chen Xianyao, Song Zhenya, Zhao Wei, et al. 2008. Uncertainty analysis of results simulated by climate

- model system [J]. *Advances in Marine Science* (in Chinese), 26 (2): 119–125, doi:10.3969/j.issn.1671-6647.2008.02.001.
- 冯涛, 李建平. 2007. 高精度迎风偏斜格式的比较与分析 [J]. *大气科学*, 31 (2): 245–253. Feng Tao, Li Jianping. 2007. A comparison and analysis of high order upwind-biased schemes [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 31 (2): 245–253, doi:10.3878/j.issn.1006-9895.2007.02.06.
- Hairer E, Nørsett S P, Wanner G. 2000. *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems* [M]. Berlin Heidelberg: Springer, 528pp.
- Hopf E. 1950. The partial differential equation  $u_t + uu_x = \mu_{xx}$  [J]. *Commun. Pure Appl. Math.*, 3 (3): 201–230, doi:10.1002/cpa.3160030302.
- 季仲贞, 王斌. 1994. 一类高时间差分精度的平方守恒格式的构造及其应用检验 [J]. *自然科学进展*, 4 (2): 149–157. Ji Zhongzhen, Wang Bin. 1994. Construction and application test of a kind of high precision scheme with square-conservation [J]. *Progress in Natural Science* (in Chinese), 4 (2): 149–157.
- 季仲贞, 李京, 王斌. 1999. 紧致平方守恒格式的构造和检验 [J]. *大气科学*, 23 (3): 323–332. Ji Zhongzhen, Li Jing, Wang Bin. 1999. Construction and test of compact scheme with square-conservation [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 23 (3): 323–332, doi:10.3878/j.issn.1006-9895.1999.03.08.
- Lele S K. 1992. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution [J]. *J. Comput. Phys.*, 103 (1): 16–42, doi:10.1016/0021-9991(92)90324-R.
- Li J P. 2005. General explicit difference formulas for numerical differentiation [J]. *J. Comput. Appl. Math.*, 183 (1): 29–52, doi:10.1016/j.cam.2004.12.026.
- Li J P, Zeng Q C, Chou J F. 2000. Computational uncertainty principle in nonlinear ordinary differential equations (I)—Numerical results [J]. *Science in China (Series E)*, 43 (5): 449–460.
- Liao S J. 2009. On the reliability of computed chaotic solutions of non-linear differential equations [J]. *Tellus A*, 61 (4): 550–564, doi:10.1111/j.1600-0870.2009.00402.x.
- Ma Y W, Fu D X. 1996. Super compact finite difference method (SCFDM) with arbitrary high accuracy [J]. *Comput. Fluid Dyn. J.*, 5 (2): 259–276.
- Mastrandrea M D, Field C B, Stocker T F, et al. 2010. Guidance Note for Lead Authors of the IPCC Fifth Assessment Report on Consistent Treatment of Uncertainties [C]. Jasper Ridge, CA, USA: Intergovernmental Panel on Climate Change.
- Takacs L L. 1985. A two-step scheme for the advection equation with minimized dissipation and dispersion errors [J]. *Mon. Wea. Rev.*, 113 (6): 1050–1065, doi:10.1175/1520-0493(1985)113<1050:ATSSFT>2.0.CO;2.
- Tal-Ezer H. 1986. Spectral methods in time for hyperbolic equations [J]. *SIAM J. Numer. Anal.*, 23 (1): 11–26, doi:10.1137/0723002.
- Tal-Ezer H. 1989. Spectral methods in time for parabolic problems [J]. *SIAM J. Numer. Anal.*, 26 (1): 1–11, doi:10.1137/0726001.
- Teixeira J, Reynolds C A, Judd K. 2007. Time step sensitivity of nonlinear atmospheric models: Numerical convergence, truncation error growth, and ensemble design [J]. *J. Atmos. Sci.*, 64 (1): 175–189, doi:10.1175/JAS3824.1.
- Von Neumann J, Goldstine H H. 1947. Numerical inverting of matrices of high order [J]. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 53 (11): 1021–1099, doi:10.1090/S0002-9904-1947-08909-6.
- Wang P F. 2017. A high-order spatiotemporal precision-matching Taylor–Li scheme for time-dependent problems [J]. *Adv. Atmos. Sci.*, 34 (12): 1461–1471, doi:10.1007/s00376-017-7018-1.
- 王鹏飞, 王在志, 黄刚. 2007. 舍入误差对大气环流模式模拟结果的影响 [J]. *大气科学*, 31 (5): 815–825. Wang Pengfei, Wang Zaizhi, Huang Gang. 2007. The influence of round-off error on the atmospheric general circulation model [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences* (in Chinese), 31 (5): 815–825, doi:10.3878/j.issn.1006-9895.2007.05.06.
- Wang P F, Li J P, Li Q. 2012. Computational uncertainty and the application of a high-performance multiple precision scheme to obtaining the correct reference solution of Lorenz equations [J]. *Numerical Algorithms*, 59 (1): 147–159, doi:10.1007/s11075-011-9481-6.
- Wang P F, Liu Y, Li J P. 2014. Clean numerical simulation for some chaotic systems using the parallel multiple-precision Taylor scheme [J]. *Chinese Sci. Bull.*, 59 (33): 4465–4472, doi:10.1007/s11434-014-0412-5.
- 吴声昌, 刘小清. 1996. KdV 方程的时间谱离散方法 [J]. *应用数学和力学*, 17 (4): 357–362. Wu Shengchang, Liu Xiaoqing. 1996. Spectral method in time for KdV equations [J]. *Applied Mathematics and Mechanics* (in Chinese), 17 (4): 357–362.