中国科学院科学出版基金资助出版

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

印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006 年 7 月第 一 版 开本：787×1092 1/16
2006 年 7 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

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。为了保障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着我们去解决。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 $\boldsymbol{x}=\{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$ 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：

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

数乘：$\alpha\boldsymbol{x}=\{\alpha x_1, \alpha x_2, \cdots, \alpha x_n\}$

式中 $\boldsymbol{x}=\{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$ 和 $\boldsymbol{y}=\{y_1, y_2, \cdots, y_n\}$ 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 $\theta=\{0, 0, \cdots, 0\}$，$\boldsymbol{x}$ 的“逆元”即为负向量 $-\boldsymbol{x}=\{-x_1, -x_2, \cdots, -x_n\}$。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 $\|x\|\geqslant 0$，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，$\|x+y\|\leqslant\|x\|+\|y\|$（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 $\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}$，式中 $\boldsymbol{x}=(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 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 $\rho(x_n, x)=\|x_n-x\|\to 0(n\to\infty)$，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 $\boldsymbol{X}^{*}$。

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 $\lim\limits_{n\to\infty}\|x_n-x\|_1\to 0$,必有 $\lim\limits_{n\to\infty}\|X_n-X\|_2\to 0$, 反之亦然。

在 V_n 空间中,也可定义元素 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 的范数为 $\|\boldsymbol{x}\|_1=\max\limits_{\boldsymbol{x}\in V_n}\{|x_1|,|x_2|,\cdots,|x_n|\}$。注意到原先的范数为 $\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}$,显然有 $\dfrac{1}{n}\cdot\|\boldsymbol{x}\|<\|\boldsymbol{x}\|_1<1\cdot\|\boldsymbol{x}\|(\forall \boldsymbol{x}\in V_n)$,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:$\lim\limits_{x\to x_0}f(x)=f(x_0)$。由于极限运算的性质,显然就有 $\lim\limits_{x\to x_0}(f+g)(x)=\lim\limits_{x\to x_0}(f(x)+g(x))=\lim\limits_{x\to x_0}f(x)+\lim\limits_{x\to x_0}g(x)=f(x_0)+g(x_0)=(f+g)(x_0)$ 以及 $\lim\limits_{x\to x_0}(\alpha f)(x)=\lim\limits_{x\to x_0}\alpha\cdot f(x)=\alpha\cdot\lim\limits_{x\to x_0}f(x)=\alpha\cdot f(x_0)=(\alpha f)(x_0)$。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 $\|f(x)\|=\max\limits_{x\in\Omega}|f(x)|$,$\forall f\in C(\Omega)$。容易验证范数三条件是满足的。事实上

1) $\|f(x)\|\geqslant 0$,且 $\|f(x)\|=0$ 等价于 $f(x)\equiv 0$,$\forall x\in\Omega$;

2) $\|\alpha f\|=\max\limits_{x\in\Omega}|\alpha\cdot f(x)|=|\alpha|\cdot\max\limits_{x\in\Omega}|f(x)|=|\alpha|\cdot\|f\|$,$\forall f\in C(\Omega)$,$\forall\alpha\in R$;

3) $\|f+g\|=\max\limits_{x\in\Omega}|f(x)+g(x)|\leqslant\max\limits_{x\in\Omega}|f(x)|+\max\limits_{x\in\Omega}|g(x)|=\|f\|+\|g\|$,$\forall f,g\in C(\Omega)$。

因此 $C(\Omega)$ 是赋范线性空间。

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

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 $\| f \|_0=\max\limits_{x\in\Omega}|f(x)|$，$\forall f\in C^m(\Omega)$ 及范数 $\| f \|_m=\max\limits_{x\in\Omega}\{|f(x)|,|\partial^k f(x)|,k=1,2,\cdots,m\}$，$\forall f\in C^m(\Omega)$，式中 $\partial^k f(x)$ 表示 $f(x)$ 的第 k 阶(偏)导数。很显然有 $\| f \|_0\leqslant\| f \|_m$，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 $p\geqslant 1$。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 $(|\alpha|+|\beta|)^p\leqslant 2^p(|a|^p+|\beta|^p)$（$p\geqslant 1$），则 $\int_a^b|f(x)+g(x)|^p dx\leqslant\int_a^b(|f(x)|+|g(x)|)^p dx\leqslant 2^P\int_a^b(|f(x)|^p+|g(x)|^p)dx\leqslant 2^P\left(\int_a^b|f(x)|^p dx+\int_b^a|g(x)|^p dx\right)<+\infty$（$\forall f$、$g\in L^p[a,b]$），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。$\forall u(x)\in L^p[a,b]$，$p\geqslant 1$，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 $\| u(x) \|\geqslant 0$。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 $\| \alpha u(x) \|=\left[\int_a^b|\alpha u(x)|^p dx\right]^{\frac{1}{p}}=\left[|\alpha|^p\int_a^b|u(x)|^p dx\right]^{\frac{1}{p}}=|\alpha|\cdot\| u(x) \|$，第二种条件满足；

3) 第三种条件应满足：$\left[\int_a^b|u(x)+v(x)|^p dx\right]^{\frac{1}{p}}\leqslant\left[\int_a^b|u(x)|^p dx\right]^{\frac{1}{p}}+\left[\int_a^b|v(x)|^p dx\right]^{\frac{1}{p}}$，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

式，需要利用赫尔德（Hölder）不等式：$\left|\int_a^b u(x)v(x)dx\right| \leqslant \left[\int_a^b |u(x)|^p dx\right]^{\frac{1}{p}} \cdot \left[\int_a^b |v(x)|^q dx\right]^{\frac{1}{q}}\left(\frac{1}{p}+\frac{1}{q}=1\right)$。特别是，当 $p=2$ 时，$L^2[a,b]$为平方可积函数空间，它的范数定义为$\| u(x) \|_{L^2} = \left[\int_a^b |u(x)|^2 dx\right]^{\frac{1}{2}}$。

而在 $p=2$ 时，$q=2$，这时的赫尔德不等式称为施瓦兹(Schwartz)不等式

$$\left|\int_a^b u(x)v(x)dx\right| \leqslant \left[\int_a^b |u(x)|^2 dx\right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left[\int_a^b |v(x)|^2 dx\right]^{\frac{1}{2}}, \forall u,v \in L^2[a,b]$$

或

$$\left|\int_a^b u(x)v(x)dx\right| \leqslant \| u(x) \|_{L^2} \cdot \| v(x) \|_{L^2}, \forall u,v \in L^2[a,b]$$

在 $L^p[a,b]$中的收敛有时称为 p 阶平均收敛。可以证明任一在 $L^p[a,b]$中的基本序列都是在 $L^p[a,b]$中的收敛序列，因此 $L^p[a,b]$是个完备的赋范线性空间，即巴拿赫(Banach)空间。

2.2 希尔伯特空间

在线性空间中，我们给出过两个元素的和以及一个元素与实数数乘的积的定义。但对线性空间中两个元素的“积”却一直没有给出过任何定义。下面，我们介绍线性空间中的一种特殊的积的概念，这就是我们常说的“内积”。它的定义可以这样来描述：设 X 是一个线性空间，R是实数域。若对于 X 中的任何一对元素 x,y，总有按某种法则对应出一个实数(x,y)，满足下列三条性质：①齐次性：$(ax,y)=a(x,y)$；②对称性：$(y,x)=(x,y)$；③非负性：$(x,x)\geqslant 0$ 且$(x,x)=0$ 等价于 $x=0$；则称(x,y)是 x,y 的内积，其中 $\alpha\in R$，$x,y\in X$。定义了内积的线性空间称为内积空间。由于用内积可以定义范数：$\| x \| = \sqrt{(x,x)}$，因此内积空间一定是赋范空间。用这种方法定义的范数称之为由内积派生的范数。

按内积的定义，很容易证明内积有下面一些性质：①$(x,\alpha y)=\alpha(x,y)$；②$(x,y+z)=(x,y)+(x,z)$；③$(\alpha x+\beta y,z)=\alpha(x,z)+\beta(y,z)$；其中 $\alpha,\beta\in R$，$x,y,z\in X$。尤其，内积满足施瓦兹不等式成立：$|(x,y)|\leqslant(x,x)^{\frac{1}{2}}\cdot(y,y)^{\frac{1}{2}}$。在范数$\| x \| = \sqrt{(x,x)}$下，施瓦兹不等式可写成：$|(x,y)|\leqslant\| x \|\cdot\| y \|$，其中$\forall x,y\in X$。

有了内积空间的概念后，就可以引入希尔伯特(Hilbert)空间的概念了。设 X 是个内积空间，若由它的内积派生的范数下，X 是个完备的赋范线性空间，即巴拿赫空间，则称空间 X 是完备的内积空间，或称为希尔伯特空间。

显然 V_n 是个希尔伯特空间，因为在 V_n 可以定义内积：$(x,y)=x_1y_1+x_2y_2+\cdots+x_ny_n$，式中 $x,y\in V_n$，而由它诱导出的范数为$\| x \|=(x,x)^{\frac{1}{2}}=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}$。在此范数下，$V_n$ 是个巴拿赫空间。又如 $L^2(\Omega)$是个希尔伯特空间，其中 Ω 是有界闭集。在其上的内积定义为$(u,v)=\left[\int_\Omega |u(x)|\cdot|v(x)|dx\right]^{\frac{1}{2}}$，诱导出的范数为$\| u \|=\left[\int_\Omega |u(x)|^2 dx\right]^{\frac{1}{2}}$，

式中 $u,v\in L^2(\Omega)$。由于 $L^2(\Omega)$是完备的赋范线性空间,因此也是希尔伯特空间。

上面谈到过,内积空间一定是赋范线性空间。那么,反过来是否成立呢?回答是在一定条件下成立。下面是赋范线性空间 X 为内积空间的充要条件(平行四边形公式)

$$\|x+y\|^2+\|x-y\|^2=2(\|x\|^2+\|y\|^2),\forall x,y\in X$$

$H^m(\Omega)$空间在 Ω 上本身及其直到 m 阶(广义)导数都是 $L^2(\Omega)$空间的函数全体组成的空间,其中 m 是非负整数,即 $H^m(\Omega)=\{u|\ u\in L^2(\Omega),\partial^n u\in L^2(\Omega),n\leqslant m\}$。容易发现它们都是线性空间,且有:$H^{m+1}(\Omega)\subset H^m(\Omega)\subset\cdots\subset H^0(\Omega)=L^2(\Omega)$。在 $H^m(\Omega)$中引进范数:$\|u\|_m=\left[\sum\limits_{n\leqslant m}\|\partial^n u\|^2_{L^2(\Omega)}\right]^{\frac{1}{2}}$ 或 $\|u\|_m=\left[\sum\limits_{n\leqslant m}\int_\Omega|\partial^n u|^2dx\right]^{\frac{1}{2}}$。还可以引进相应的内积 $(u,v)_m=\sum\limits_{n\leqslant m}(\partial^n u,\partial^n v)$或$(u,v)_m=\sum\limits_{n\leqslant m}\int_\Omega\partial^n u\cdot\partial^n v dx$。其中$(\cdot,\cdot)$是 $L^2(\Omega)$中的内积。可以验证 $H^m(\Omega)$是一个希尔伯特空间。

2.3 有界线性算子与有界线性泛函

在这一部分,我们来介绍算子与泛函的概念。首先介绍算子。设 X 和 Y 是函数空间,若对于 X 中的子集 D_T 中的每一函数 $x(t)$,都按照某一规则有确定的 Y 中子集 R_T 中的一函数 $y(t)$与之对应,则称在 D_T 上定义了一个算子 T,记作 $y=Tx$· D_T 称为 T 的定义域,R_T 称为 T 的值域。若算子 T 满足线性条件:①可加性:$T(x_1+x_2)=Tx_1+Tx_2$;②齐次性:$T(\alpha x)=\alpha\cdot Tx$;其中 $\forall\alpha\in R,\forall x_1,x_2,x\in D_T$;则称算子 T 为线性算子。若 X 和 Y 是定义有距离的函数空间(更一般地可以是定义有极限概念的函数空间),当有序列$\{x_n\}\subset D_T$,$\lim\limits_{n\to\infty}x_n=x$ 时就有$\{Tx_n\}\subset R_T$ 且$\lim\limits_{n\to\infty}Tx_n=Tx\in R_T$,则称算子 T 为连续算子。要注意的是$\{x_n\}$的收敛是依 X 上的极限概念收敛的,而$\{Tx_n\}$的收敛是依 Y 上的极限概念收敛的。这两个极限概念的定义不一定都是一样的。若 X 和 Y 都是赋范线性函数空间,如果存在正数 M,使对于任何 $x\in D_T$,有$\|Tx\|\leqslant M\|x\|$,则称算子 T 为有界算子。

在赋范线性函数空间中,上述各种算子性质有一定的联系。譬如,有限维空间的线性算子必连续、有界。再譬如,对于一般情况,线性算子 T 是连续算子的充要条件是 T 为有界算子。充分性的证明可以利用下列不等式(根据有界的定义):$\|Tx_n-Tx\|=\|T(x_n-x)\|\leqslant M\|x_n-x\|$,从而$\lim\limits_{n\to\infty}\|Tx_n-Tx\|=0$,即$\lim\limits_{n\to\infty}Tx_n=Tx$,$T$ 为连续。而必要性的证明可用反证法。假设 T 是连续的但无界,则对于每个 n,必可找出 $x_n\in D_T$,使得$\|Tx_n\|>n\|x_n\|$。令 $y_n=\dfrac{x_n}{n\|x_n\|}$,则$\|y_n\|=\dfrac{1}{n}$,$\lim\limits_{n\to\infty}y_n=\theta$($\theta$ 为零元)。由 T 的连续性:$\lim\limits_{n\to\infty}Ty_n=T\theta=\theta$,从而有$\lim\limits_{n\to\infty}\|Ty_n\|=0$。另一方面,$\|Ty_n\|=\left\|\dfrac{Tx_n}{n\cdot\|x_n\|}\right\|\geqslant\dfrac{n\|x_n\|}{n\|x_n\|}=1$,矛盾!说明 T 不可能是无界算子。

与算子相类似,我们给出泛函的概念。设 X 是函数空间。若对于 X 中的子集 D_f 中的每一函数 $x(t)$,都按照某一规则有确定的一实数 y 与之对应,则称在 D_f 上定义了一个泛函 f,记作 $y=f(x)$。D_f 称为 f 的定义域。显然泛函 f 的值域 R_f 是实数空间的子集。若泛

函 f 满足线性条件：①可加性：$f(x_1+x_2)=f(x_1)+f(x_2)$；②齐次性：$f(\alpha x)=\alpha f(x)$；其中 $\forall \alpha\in R, \forall x_1, x_2, x\in D_f$，则称泛函 f 为线性泛函。类似地，我们可以定义连续泛函和有界泛函。而且，线性泛函、连续泛函和有界泛函的联系与算子类同。如有限维赋范线性函数空间上的线性泛函必连续且有界；一般情形下一个线性泛函为连续泛函的充要条件是它为有界泛函。

为了加深理解，下面来举出一些算子和泛函的例子。

第一个例子是费雷德霍姆（Fredholm）算子。设函数 $\rho(x,y)$ 在矩形区域 $\alpha\leqslant x\leqslant b, a\leqslant y\leqslant b$ 上连续，作变换：$K\varphi(x)=\psi(x)=\int_a^b\rho(x,y)\varphi(y)\,dy, \forall\varphi\in C[a,b]$。显然，$\psi(x)\in C[a,b]$，于是 K 是 $C[a,b]$ 到 $C[a,b]$ 的算子。由于变换用积分定义，而积分运算有线性性质，显见算子 K 是线性的。我们知道 $C[a,b]$ 是赋范线性空间，且显然有 $\|K\varphi\|=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|\psi(x)|\leqslant\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}\int_a^b|\rho(x,y)|\,dy\cdot\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|\varphi(x)|=M\cdot\|\varphi\|$，其中 $\|\varphi\|=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|\varphi(x)|$，$M=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}\int_a^b|\rho(x,y)|\,dy$，因此 K 也是有界的，而且由前面的讨论可知该算子也是连续的。算子 K 就称为费雷德霍姆算子。

若函数 $\rho(x,y)$ 在矩形区域 $a\leqslant x\leqslant b, a\leqslant y\leqslant b$ 上只是平方可积的，即满足：$\int_a^b\int_a^b|\rho(x,y)|^2\,dxdy<+\infty$，则对 $\forall\varphi\in L^2[a,b]$ 算子 $K\varphi(x)=\psi(x)=\int_a^b\rho(x,y)\varphi(y)\,dy$ 是 $L^2[a,b]$ 到 $L^2[a,b]$ 的有界线性（连续）算子。事实上，根据施瓦茨（Schwarz）不等式可以得到 $|K\varphi(x)|^2\leqslant\int_a^b|\varphi(y)|^2\,dy\cdot\int_a^b|\rho(x,y)|^2\,dy=\|\varphi\|^2\cdot\int_a^b|\rho(x,y)|^2\,dy$。再在 $[a,b]$ 上积分，则得 $\|K\varphi\|^2\leqslant\|\varphi\|^2\cdot\int_a^b\int_a^b|\rho(x,y)|^2\,dxdy=M^2\cdot\|\varphi\|^2$，故 $\|K\varphi\|\leqslant M\|\varphi\|$，其中 $\varphi\in L^2[a,b]$，$M^2=\int_a^b\int_a^b|\rho(x,y)|^2\,dxdy$。显然，算子是线性，而且是连续的。

下面给一个线性泛函的例子。在有限维赋范线性函数空间 V_n 中，设其基底为 $e_1, e_2, \cdots, e_n$，则 V_n 中的任意一个元素可表示成：$x=\sum\limits_{i=1}^{n}x_ie_i$，或 $x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)$。作泛函 $f(x)=(a,x)=\sum\limits_{i=1}^{n}a_ix_i$，其中 $a=(a_1, a_2, \cdots, a_n)$ 是一个常向量。显然它是线性泛函。注意到 $|f(x)|=|(a,x)|\leqslant\|a\|\cdot\|x\|$，令 $M=\|a\|$，即得 $|f(x)|\leqslant M\cdot\|x\|$，其中 $\|x\|=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}$，由此可见它是有界的，从而也是连续的。

再给一个连续空间泛函的例子。在 $C[a,b]$ 上作泛函：$I(x)=\int_a^b x(t)\,dt$。由 $|I(x)|\leqslant\int_a^b|x(t)|\,dt\leqslant\max\limits_{a\leqslant t\leqslant b}|x(t)|\cdot(b-a)$ 即可推出该泛函的有界性：$|I(x)|\leqslant M\cdot\|x\|$，其中 $M=b-a$，$\|x\|=\max\limits_{a\leqslant t\leqslant b}|x(t)|$。另外，它显然是一个线性泛函，所以，它也是连续的。

必须指出，这一泛函作为 $L^2[a,b]$ 上的泛函也是有界线性连续的。

有了有界线性算子的概念后，我们进一步来介绍共轭（伴随）微分算子的概念。设 M_1，

M_2 是两个定义了内积的函数集合，对于由 M_1 到 M_2 的线性微分算子 T，总存在由 M_2 到 M_1 的算子 T^*，使 $(Tu,v)=(u,T^*v)+B(u,v)(\forall u\in D_T, v\in D_{T^*})$ 成立。则称 T^* 是 T 的共轭(伴随)微分算子。其中 $(\cdot,\cdot)$ 是内积，$B(u,v)$ 是边界项，$D_T=M_2$ 和 $D_{T^*}=M_1$ 分别是算子 T 和 T^* 的定义域。若边界项 $B(u,v)$ 为零，则 $(Tu,v)=(u,T^*v)$。特别，当 $T^*=T$ 时，则称 T 是自共轭(自伴随)微分算子或对称微分算子。

为了加深对自共轭微分算子的理解，下面举例说明。设 $y(x)\in C^2[a,b]\subset L^2[a,b]$，$p_0''(x), p_1'(x), p_2(x)\in C[a,b]$ 且 $p_0(x)\neq 0$。作 $C^2[a,b]\to C^2[a,b]$ 的二阶线性微分算子：$Ly=p_0(x)y''+p_1(x)y'+p_2(x)y$。由分部积分得：$(Ly,z)=\int_a^b(p_0y''+p_1y'+p_2y)zdx=\int_a^b[(p_0z)''-(p_1z)'+p_2z]ydx+[p_0(y'z-yz')+(p_1-p_0')yz]_a^b=(y,L^*z)+B(y,z)$，其中共轭微分算子为：$L^*z\equiv(p_0z)''-(p_1z)'+p_2z=p_0z''+(2p_0'-p_1)z'+(p_0''-p_1'+p_2)z$，而边界项为：$B(y,z)=[p_0(y'z-yz')+(p_1-p_0')yz]_a^b$。要使 $L^*=L$，当且仅当下面两式成立：$2p_0'-p_1=p_1$，$p_0''-p_1'+p_2=p_2$，也就是 $p_0'=p_1$ 成立。于是得自共轭微分算子 $Ly\equiv p_0y'''+p_1y'+p_2y=p_0y''+p'y'+p_2y=(p_0y')'+p_2y$。

我们再给出一个关于线性微分方程组的共轭算子的例子。对于下面常微分方程组：

$$\begin{cases}\dfrac{d\varphi_2}{dx}+(\lambda-B)\varphi_1=0\\[2ex] \mathrm{D}\dfrac{d\varphi_1}{dx}-\varphi_2=0\end{cases}\qquad \varphi_1(0)=\varphi_1(1)=0$$

式中 λ 是特征数，D 和 B 是逐段光滑函数($B\geqslant 0$)。引进向量函数 $f=(f_1,f_2)^T$ 及其向量函数集合 $\Omega=\{f|f=(f_1,f_2)^T$，其中 $f_1,f_2\in C^1[0,1]$，且满足：$f_1(0)=f_2(1)=0\}$。设 L 是线性算子，它按下面形式作用在集合 Ω 的元素 f 上：$Lf=\begin{bmatrix}\lambda-B & \dfrac{d}{dx}\\ D\dfrac{d}{dx} & -1\end{bmatrix}f$，其中 L 为一个二阶矩阵：$L=\begin{bmatrix}\lambda-B & \dfrac{d}{dx}\\ D\dfrac{d}{dx} & -1\end{bmatrix}$。根据共轭算子得定义(在齐次边界条件下，边界项为零)：$(f^*,Lf)=(f,L^*f^*)$，我们来求共轭算子 L^*，这里 $f^*=(f_1^*,f_2^*)^T$。定义 Ω 上的内积为 $(f,g)=\int_0^1(f_1g_1+f_2g_2)dx$，则 $(f^*,Lf)=\int_0^1\left[f_1^*\left[\dfrac{df_2}{dx}+(\lambda-B)f_1\right]+f_2^*\left[D\dfrac{df_1}{dx}-f_2\right]\right]dx=\int_0^1\left[f_1\left[-\dfrac{d(Df_2^*)}{dx}+(\lambda-B)f_1^*\right]+f_2\left[-\dfrac{df_1^*}{dx}-f_2^*\right]\right]dx=(f,L^*f^*)$。这样我们便得到共轭算子的作用项：$L^*f^*=\begin{bmatrix}-\dfrac{d(Df_2^*)}{dx}+(\lambda-B)f_1^*\\ -\dfrac{df_1^*}{dx}-f_2^*\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\lambda-B & -\dfrac{d}{dx}D\\ -\dfrac{d}{dx} & -1\end{bmatrix}f^*$，所以共轭算子为

$$L^{*}=\begin{pmatrix}\lambda-B & -\dfrac{d}{dx}D\\ -\dfrac{d}{dx} & -1\end{pmatrix}$$

令 $\varphi=(\varphi_1,\varphi_2)^T\in\Omega$ 为常微分方程组的解,则它满足:$L\varphi=0$。相应的共轭(伴随)方程为:$L^{*}\varphi^{*}=0$ 或

$$\begin{cases}-\dfrac{d(D\varphi_2^{*})}{dx}+(\lambda-B)\varphi^{*}=0\\ -\dfrac{d\varphi_1^{*}}{dx}-\varphi_2^{*}=0\end{cases}\qquad \varphi_1^{*}(0)=\varphi_1^{*}(1)=0$$

这里 φ^{*} 为 φ 的共轭(伴随)函数。在变分资料同化方法的发展过程中,共轭或伴随算子曾起了重要的作用,这里特提醒读者引起注意。

上面的例子是关于线性微分方程的共轭算子。对于非线性微分方程,它的共轭算子会是怎样一种形式呢?我们来看看下面的例子。考虑用流函数表示的正压涡度方程 $\Delta^2\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}+J(\Delta^2\varphi,\varphi)+\beta\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}=0$,这里符号 $J(A,B)=\dfrac{\partial A}{\partial x}\dfrac{\partial B}{\partial y}-\dfrac{\partial A}{\partial y}\dfrac{\partial B}{\partial x}$,$J$ 为雅可比(Jacobi)算子,所以方程也可具体写成:$\Delta^2\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}+\dfrac{\partial(\Delta^2\varphi)}{\partial x}\dfrac{\partial\varphi}{\partial y}-\dfrac{\partial(\Delta^2\varphi)}{\partial y}\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}+\beta\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}=0$。由于 $\dfrac{\partial(\Delta^2\varphi)}{\partial x}\dfrac{\partial\varphi}{\partial y}-\dfrac{\partial(\Delta^2\varphi)}{\partial y}\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\Delta^2\varphi\dfrac{\partial\varphi}{\partial y}\right)-\dfrac{\partial}{\partial y}\left(\Delta^2\varphi\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}\right)$,因此上述方程可以写成 $\Delta^2\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}+\left[\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\Delta\varphi\dfrac{\partial}{\partial y}\right)-\dfrac{\partial}{\partial y}\left(\Delta^2\varphi\dfrac{\partial}{\partial x}\right)+\beta\dfrac{\partial}{\partial x}\right]\varphi=0$,或 $\Delta^2\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}+A\varphi=0$。这里算子 A 为:$A=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\Delta\varphi\dfrac{\partial}{\partial y}\right)-\dfrac{\partial}{\partial y}\left(\Delta^2\varphi\dfrac{\partial}{\partial x}\right)+\beta\dfrac{\partial}{\partial x}$。假设函数 φ 在矩形区域 $a\leqslant x\leqslant b$; $c\leqslant y\leqslant d$ 连续可微,并且在区域边界上满足周期性条件,则根据共轭算子的定义:$(\varphi^{*},A\varphi)=(\varphi,A^{*}\varphi^{*})$ 可求出共轭算子 A^{*}。作内积

$$(\varphi^{*},A\varphi)=\int_a^b\int_c^d\varphi^{*}\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\Delta^2\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\Delta^2\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)+\beta\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right]dx\,dy$$

上式右端各项分别对积分变量 x 和 y 进行分部积分,并用到边界条件,得到

$$(\varphi^{*},A\varphi)=\int_a^b\int_c^d\varphi\left[-\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\Delta^2\varphi\frac{\partial}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\Delta^2\varphi\frac{\partial}{\partial x}\right)+\beta\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi^{*}\right]dx\,dy=(\varphi,A^{*}\varphi^{*})$$

这样得到共轭算子为:$A^{*}=-\left(\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\Delta^2\varphi\dfrac{\partial}{\partial y}\right)-\dfrac{\partial}{\partial y}\left(\Delta^2\varphi\dfrac{\partial}{\partial x}\right)+\beta\dfrac{\partial}{\partial x}\right)=-A$。这样的算子 A 称为反对称算子。原非线性微分方程的共轭方程为:$-\Delta^2\dfrac{\partial\varphi^{*}}{\partial t}+A^{*}\varphi^{*}=0$,其中 φ^{*} 为 φ 的共轭函数。

对于从事大气科学的科研工作者,最感兴趣的还是大气动力学方程组的共轭算子。为了讨论简洁,我们考虑球面正压大气浅水波方程组:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}+\dfrac{u}{a\cos\theta}\dfrac{\partial u}{\partial\lambda}+\dfrac{v}{a}\dfrac{\partial u}{\partial\theta}-fv+\dfrac{1}{a\cos\theta}\dfrac{\partial\varphi}{\partial\theta}=0\\ \dfrac{\partial v}{\partial t}+\dfrac{u}{a\cos\theta}\dfrac{\partial v}{\partial\lambda}+\dfrac{v}{a}\dfrac{\partial v}{\partial\theta}+fu+\dfrac{1}{a}\dfrac{\partial\varphi}{\partial\theta}=0\\ \dfrac{\partial\varphi}{\partial t}+\dfrac{1}{a\cos\theta}\left[\dfrac{\partial u\varphi}{\partial\lambda}+\dfrac{\partial v\cos\theta\varphi}{\partial\theta}\right]=0\end{cases}$$

式中 λ,θ 分别为经度和纬度，a 为地球半径，$f=2\omega\sin\theta$ 为地转参数，u,v,φ 分别为纬向风、经向风和位势高度，是以 a 为半径的球面 Ω：$0\leqslant\lambda\leqslant2\pi,-\dfrac{\pi}{2}\leqslant\theta\leqslant\dfrac{\pi}{2}$ 上的连续函数，在东西方向(λ)满足周期边界条件：$s(\lambda+2\pi,\theta,t)=s(\lambda,\theta,t)(s=u,v,\varphi)$，而在南北方向满足：$v\left(\lambda,-\dfrac{\pi}{2},t\right)=v\left(\lambda,\dfrac{\pi}{2},t\right)=0$。引进矢量函数 F 及其矩阵算子 A：

$$F=\begin{pmatrix}u\\ v\\ \varphi\end{pmatrix},\qquad A=\begin{pmatrix}\Pi & -f & \dfrac{1}{a\cos\theta}\dfrac{\partial}{\partial\lambda}\\ f & \Pi & \dfrac{1}{a}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\\ 0 & 0 & K\end{pmatrix}$$

式中算子符号 $\Pi=\dfrac{u}{a\cos\theta}\dfrac{\partial}{\partial\lambda}+\dfrac{v}{a}\dfrac{\partial}{\partial\theta}$，$K=\dfrac{1}{a\cos\theta}\left[\dfrac{1}{\partial\lambda}u+\dfrac{\partial}{\partial\theta}v\cos\theta\right]$，则原大气动力方程组可写为 $\dfrac{\partial F}{\partial t}+AF=0$。在球面 Ω 上定义内积：$(F_1,F_2)=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos\theta d\theta\int_0^{2\pi}(u_1u_2+v_1v_2+\varphi_1\varphi_2)a^2d\lambda$，其中 $F_1=\begin{pmatrix}u_1\\ v_1\\ \varphi_1\end{pmatrix}$，$F_2=\begin{pmatrix}u_2\\ v_2\\ \varphi_2\end{pmatrix}$。则 $(F^*,AF)=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos\theta d\theta\int_0^{2\pi}\left[u^*\left(\Pi u-fv+\dfrac{1}{a\cos\theta}\dfrac{\partial\varphi}{\partial\lambda}\right)+v^*\left(\Pi v+fu+\dfrac{1}{a}\dfrac{\partial\varphi}{\partial\theta}\right)+\varphi^*K\varphi\right]a^2d\lambda$。由于 $s^*\Pi s=K(s^*s)-sKs^*$，$s^*Ks=K(s^*s)-s\Pi s^*$（这两个等式请读者自证），$\dfrac{u^*}{a\cos\theta}\dfrac{\partial\varphi}{\partial\lambda}=\dfrac{1}{a\cos\theta}\left[\dfrac{\partial u^*\varphi}{\partial\lambda}-\varphi\dfrac{\partial u^*}{\partial\lambda}\right]$，$\dfrac{v^*}{a}\dfrac{\partial\varphi}{\partial\theta}=\dfrac{1}{a\cos\theta}\cdot\left[\dfrac{\partial v^*\cos\theta\varphi}{\partial\theta}-\varphi\dfrac{\partial v^*\cos\theta}{\partial\theta}\right]$，且在前面给定的边界条件下有 $\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos\theta d\theta\int_0^{2\pi}K(s^*s)a^2d\lambda=0$，$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos\theta d\theta\int_0^{2\pi}\dfrac{1}{a\cos\theta}\dfrac{\partial u^*\varphi}{\partial\lambda}a^2d\lambda=0$ 和 $\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos\theta d\theta\int_0^{2\pi}\dfrac{1}{a\cos\theta}\dfrac{\partial v^*\cos\theta\varphi}{\partial\theta}a^2d\lambda=0$，因此可以推导出等式 $(F^*,AF)=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos\theta d\theta\int_0^{2\pi}[u(-Ku^*+fv^*)+v(-Kv^*-fu^*)+\varphi(-\Pi\varphi^*-D)]\cdot a^2d\lambda=(F,A^*F^*)$，其中 $D=\dfrac{1}{a\cos\theta}\left(\dfrac{\partial u^*}{\partial\lambda}+\dfrac{\partial v^*\cos\theta}{\partial\theta}\right)$。这样我们便得到球面正压大气浅水波方程的共轭算子 A^*：$A^*=\begin{bmatrix}-K & f & 0\\ -f & -K & 0\\ -\dfrac{1}{a\cos\theta}\dfrac{\partial}{\partial\lambda} & -\dfrac{1}{a\cos\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\cos\theta & -\Pi\end{bmatrix}$。它的共轭（伴随）方程为

$\frac{\partial F^*}{\partial t}+A^*F^*=0$，或具体写为

$$\begin{cases}\frac{\partial u^*}{\partial t}-\frac{1}{a\cos\theta}\left[\frac{\partial uu^*}{\partial\lambda}+\frac{\partial vu^*\cos\theta}{\partial\theta}\right]+fv^*=0\\ \frac{\partial v^*}{\partial t}-\frac{1}{a\cos\theta}\left[\frac{\partial uv^*}{\partial\lambda}+\frac{\partial vv^*\cos\theta}{\partial\theta}\right]-fu^*=0\\ \frac{\partial\varphi^*}{\partial t}-\frac{1}{a\cos\theta}\left[\frac{\partial u^*}{\partial\lambda}+\frac{\partial v^*\cos\theta}{\partial\theta}\right]-\frac{u}{a\cos\theta}\frac{\partial\varphi^*}{\partial\lambda}-\frac{v}{a}\frac{\partial\varphi^*}{\partial\theta}=0\end{cases}$$

式中 $F^*=\begin{pmatrix}u^*\\v^*\\\varphi^*\end{pmatrix}$为 $F=\begin{pmatrix}u\\v\\\varphi\end{pmatrix}$的共轭函数。

从上面的讨论可知，在求共轭算子时，有以下规则：

1）偶次导数前的符号不变，奇次导数前的符号改变；

2）导数前的系数移入微商号下；

3）积分号内外的系数互换位置；

4）对于方程组的情况，还要将矩阵转置。

从上面的讨论可知，在赋范线性空间中可以定义很多有界线性算子。这些算子当然也可构成一个集合，称为算子集合。设 $B(X,Y)$是赋范线性函数空间 X 到赋范线性函数空间 Y 的全体有界线性（连续）算子组成的集合。在 $B(X,Y)$中引进加法和数乘：

加法：$(T_1+T_2)x=T_1x+T_2x,\forall T_1,T_2\in B,x\in X$，

数乘：$(aT)x=aTx,\forall T\in B,a\in K,x\in X.$

则 $B(X,Y)$称为在 R 上的线性算子空间。这时“零元”为零算子，即使 $Tx=\theta,\forall x\in X$ 成立的算子。

由于算子的有界性，可定义算子的范数为 $\|T\|$，如取 $\|T\|=\sup\limits_{\substack{x\in X\\x\neq 0}}\frac{\|Tx\|}{\|x\|}$，这样有 $\|Tx\|\leqslant\|T\|\cdot\|x\|,\forall x\in X$，于是 $B(X,Y)$构成赋范线性空间，称为有界线性算子空间或简称线性算子空间。

利用通常意义下范数的定义，可以验证上面定义的算子范数也同样满足范数的三个条件。有兴趣的读者可以自己验证一下。

2.4 变分原理

在大气科学领域，有一个热门的前沿学科分支，叫做气象变分资料同化，即把变分的概念引入气象资料处理和分析之中。目前，该方法已在气象科研和业务中得到了广泛应用。因此，在预备知识的章节里专门介绍一下变分原理是非常有益的。我们先从力学中的最小位能原理谈起。所谓最小位能原理是指：一个受外力作用的弹性体，在满足已知边界约束的一切可能位移中，处于平衡状态时的位移将使总位能最小。这里的总位能在弹性力学中是指“应变能”和“外力做的功”之差。

设弹性体的范围为 Ω，其边界为 $\partial\Omega$，弹性体的形变(位移)为 u，它显然是定义在 Ω 上的函数。在小变形的情况下“应变能” $D(u,u)$ 是关于函数 u 的一个二次齐次泛函，而“外力做的功” $F(u)$ 则是关于函数 u 的一个线性泛函。因此总位能可表示成 $V(u)=\frac{1}{2}D(u,u)-F(u)$。这里所谓“二次齐次泛函”是指它满足关系式：$D(tu,tu)=t^2D(u,u)$。实际上，我们可假定关于函数 u,v 的泛函 $D(u,v)$ 是 u,v 的双线性泛函，即它满足性质：$D(\alpha_1u_1+\alpha_2u_2,\beta_1v_1+\beta_2v_2)=\alpha_1\beta_1D(u_1,v_1)+\alpha_2\beta_1D(u_2,v_1)+\alpha_1\beta_2D(u_1,v_2)+\alpha_2\beta_2D(u_2,v_2)$，也即关于 u 是线性的，关于 v 也是线性的，其中 $\alpha_i,\beta_i,(i=1,2)$ 为任意常数。显然，当 $D(u,v)$ 为双线性泛函时，$D(u,u)$ 必为二次齐次泛函。事实上，$D(tu,tu)=tD(u,tu)=t^2D(u,u)$。

所谓“满足已知边界约束的一切可能位移”是指函数 u 应属于某一个函数集合 M，它使得 $V(u)$ 有意义，即 $V(u)<+\infty$，且满足一定的边界条件。因此，最小位能原理的数学形式是：求 $u^*\in M$，使得 $V(u^*)=\min\limits_{u\in M}V(u)$，其中 $V(u)=\frac{1}{2}D(u,u)-F(u)$，$F(u)$ 为一线性泛函，$V(u)$ 的定义域为 $M=\{u|V(u)<+\infty$，u 满足一定边界条件$\}$。这实际上就是一个泛函极值问题——变分问题。显然函数 u^* 被称为变分问题的解。

设泛函 $V[y]$ 定义在距离为 ρ 的函数的线性集合 M 上。我们仿照函数的微分概念来定义泛函的变分概念。设 $y_0\in M$，称 $\delta y=y-y_0(\forall y\in M,y\neq y_0)$ 是函数 y 在 y_0 处的变分。显然，对任意 $y\in M$，可记 $y=y_0+\delta y$，由 y 的变分引起了泛函 $V[y]$ 的增量：$\Delta V=V[y]-V[y_0]=V[y_0+\delta y]-V[y_0]$。如果此增量可被表达成 $\Delta V=L[y_0,\delta y]+\beta[y_0,\delta y]\cdot\rho(y,y_0)$，其中 $L[y_0,\delta y]$ 是关于 δy 的线性泛函，且泛函 $\beta[y_0,\delta y]$ 在 $\rho(y,y_0)\to 0$ 时是无穷小量，即 $\lim\limits_{\rho(y,y_0)\to 0}\beta[y_0,\delta y]=0$，则称线性泛函 $L[y_0,\delta y]$ 是泛函 $V[y]$ 在 y_0 处的变分，记作 $\delta V[y_0]=L[y_0,\delta y]$。

由于变分的定义是仿照微分的定义，因此变分的运算法则也和微分运算法则一样，这里就不作详细讨论了。作为一个例子，我们来计算泛函 $V[y]=\int_{x_0}^{x_1}F(x,y,y')dx$ 的变分。我们假定函数 F 关于它的变元具有二阶连续偏导数，记作 $F\in C^2$。又假定 $V[y]$ 是定义在函数集 $M=\{y\in C^1[x_0,x_1]\}$ 上。显然

$$\Delta V=V[y+\delta y]-V[y]=\int_{x_0}^{x_1}[F(x,y+\delta y,y'+\delta y')-F(x,y,y')]dx$$

把被积函数在(x,y,y')点展开成 Taylor(泰勒)级数，则有

$$\Delta V=\int_{x_0}^{x}(F_y\delta y+F_{y'}\delta y'+\cdots)dx=\int_{x_0}^{x}(F_y\delta y+F_{y'}\delta y')dx+\cdots$$

这里略去的部分是关于 δy 和 $\delta y'$ 的高阶项，而前面的积分项 $I[\delta y]$ 是关于 δy 的线性泛函。事实上，只要注意到 $(\delta y)'=(\bar{y}-y)'=\bar{y}'-y'=\delta y'$，即求导和变分对于函数 y 是次序可交换的，就有 $I[a\delta y_1+\beta\delta y_2]=\int_{x_0}^{x_1}[F_y(a\delta y_1+\beta\delta y_2)+F_{y'}(a\delta y_1'+\beta\delta y_2')]dx=a\int_{x_0}^{x_1}(F_y\delta y_1+F_{y'}\delta y_1')dx+\beta\int_{x_0}^{x_1}(F_y\delta y_2+F_{y'}\delta y_2')dx=aI[\delta y_1]+\beta I[\delta y_2]$。因此，按定义，泛函 $V[y]$ 的变分为 $\delta V[y]=\int_{x_0}^{x_1}(F_y\delta y+F_{y'}\delta y')dx$。如果记 $\delta F=F_y\delta y+F_{y'}\delta y'$，称 δF 为函数 F 的变分，则

有 $\delta V[y]=\int_{x_0}^{x_1}\delta F dx$ 或 $\delta\int_{x_0}^{x_1}F dx=\int_{x_0}^{x_1}\delta F dx$,这表示变分和积分次序可交换。

假如函数集为 $M=\{y\in C^2(x_0,x_1)\cap C^1[x_0,x_1]\}$时,则由分部积分法,可求得

$$\delta V[y]=\int_{x_0}^{x_1}(F_y\delta y+F_{y'}\delta y')dx=\int_{x_0}^{x_1}\left(F_y-\frac{d}{dx}F_{y'}\right)\delta y dx+F_{y'}\delta y\Big|_{x=x_0}^{x=x_1}$$

假如 $M=\{y\mid y\in C^2(x_0,x_1)\cap C^1[x_0,x_1],y(x_0)=y_0,y(x_1)=y_1\}$,则有 $\delta y|_{x=x_0}=0$,$\delta y|_{x=x_1}=0$,这时 $\delta V[y]=\int_{x_0}^{x_1}\left(F_y-\frac{d}{dx}F_{y'}\right)\delta y dx$。

关于本书要用到的一些关于泛函分析的主要基本概念和预备知识就介绍到这里,由于篇幅的限制,介绍比较简单。读者也可参阅其他相关著作,以作详细了解。

第 3 章　发展方程与平方守恒差分格式

3.1　发展方程及其差分格式

地球是人类生存的唯一地方，它的表面主要由陆地、海洋和冰雪组成，还环绕着一层薄薄的大气层，这些都与人类生息相关。尤其是大气和海洋直接影响着人们的生命安全和生产活动。因此，人们非常关注它们过去、现在和未来的状态和行为。

无论是大气还是海洋，它们都可以看作是连续的流体介质，有许多共同的流体动力学特征，可以把最基本的动力学概念应用到它们的上面来，建立起大气动力学方程和海洋动力学方程。这是最典型的地球流体力学方程，它们往往是复杂的、非线性的，也不知道是否有一般解存在。为了探讨像大气、海洋之类的地球流体运动的主要物理特性，有必要发展相应的数值方法，通过计算机获得近似的数值解，从而认识和了解其运动的演变规律。

数值求解的方法有很多，常用的有：有限元法、有限差分法和谱方法等。对于大气、海洋方程而言，有限差分法是最常用的求解方法。该方法的最大优点就是直观、易行，并便于重要物理守恒性的保持。而该方法最突出的问题之一是计算稳定性问题，尤其是非线性计算稳定性问题。因此，对这类问题如何构造出计算稳定的计算格式是一个很重要的课题。在本章中，我们将对这一问题作初步的探讨。

计算地球流体力学中要求解的方程一般都可以化为如下算子形式的“发展方程”：

$$\frac{\partial F}{\partial t}+\mathcal{A}F=G \tag{3.1}$$

式中 $F=F(x,t)$ 是待求函数，$G=G(x,t)$ 是已知函数，$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 是空间坐标，n 是空间维数，t 为时间坐标。$\mathcal{A}=\mathcal{A}(F,x,t)$是一个线性或非线性算子。

例如，对于如下正压大气浅水波方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}+u\dfrac{\partial u}{\partial x}+v\dfrac{\partial u}{\partial y}+\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}-fv=0\\[2ex]\dfrac{\partial v}{\partial t}+u\dfrac{\partial v}{\partial x}+v\dfrac{\partial v}{\partial y}+\dfrac{\partial\varphi}{\partial y}+fu=0\\[2ex]\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}+\dfrac{\partial u\varphi}{\partial x}+\dfrac{\partial v\varphi}{\partial y}=0\end{cases} \tag{3.2}$$

若将其写成算子方程(3.1)的形式，则 F 和 $\mathcal{A}$ 应为

$$F=\begin{pmatrix}u\\v\\\varphi\end{pmatrix},\qquad \mathcal{A}=\begin{pmatrix}u\dfrac{\partial}{\partial x}+v\dfrac{\partial}{\partial y} & -f & \dfrac{\partial}{\partial x}\\[2ex] f & u\dfrac{\partial}{\partial x}+v\dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial y}\\[2ex] 0 & 0 & \dfrac{\partial}{\partial x}u+\dfrac{\partial}{\partial y}v\end{pmatrix}$$

同样,对于正压无辐散涡度方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial \zeta}{\partial t}+u\dfrac{\partial \zeta}{\partial x}+v\dfrac{\partial \zeta}{\partial y}=0\\[2ex]\dfrac{\partial u}{\partial x}+\dfrac{\partial v}{\partial y}=0,\left(\zeta=\dfrac{\partial v}{\partial x}-\dfrac{\partial u}{\partial y}\right)\end{cases}\tag{3.3}$$

有 $F=\zeta,\mathcal{A}=u\dfrac{\partial}{\partial x}+v\dfrac{\partial}{\partial y}$。

对于最简单的一维非线性平流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}=0\tag{3.4}$$

有 $F=u,\mathcal{A}=u\dfrac{\partial}{\partial x}$。

为了便于构造差分格式,可以分别把式(3.3),式(3.4)改写成如下等价形式

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t}+\frac{1}{2}\left[u\frac{\partial \zeta}{\partial x}+\frac{\partial u\zeta}{\partial x}\right]+\frac{1}{2}\left[v\frac{\partial \zeta}{\partial y}+\frac{\partial v\zeta}{\partial y}\right]=0\tag{3.5}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{1}{3}\left[u\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial uu}{\partial x}\right]=0\tag{3.6}$$

对于方程(3.2),也可以类似写成

$$\begin{cases}\dfrac{\partial U}{\partial t}+\dfrac{1}{2}\left[u\dfrac{\partial U}{\partial x}+\dfrac{\partial uU}{\partial x}+v\dfrac{\partial U}{\partial y}+\dfrac{\partial vU}{\partial y}\right]+H\dfrac{\partial \varphi}{\partial x}-fV=0\\[2ex]\dfrac{\partial V}{\partial t}+\dfrac{1}{2}\left[u\dfrac{\partial V}{\partial x}+\dfrac{\partial uV}{\partial x}+v\dfrac{\partial V}{\partial y}+\dfrac{\partial vV}{\partial y}\right]+H\dfrac{\partial \varphi}{\partial y}+fU=0\\[2ex]\dfrac{\partial \varphi}{\partial t}+\dfrac{\partial HU}{\partial x}+\dfrac{\partial HV}{\partial y}=0\end{cases}\tag{3.7}$$

式中 $H=\sqrt{\varphi},U=Hu,V=Hv$。即使是三维斜压原始方程也可以作类似改写。改写后的方程(3.5),式(3.6)和式(3.7)仍可以表示为算子方程式(3.1)的形式,只不过这时相应的算子 $\mathcal{A}$ 的定义有所不同罢了。为了记住算子是依赖于函数 F 的,将 $\mathcal{A}$ 标记为 $\mathcal{A}_F$,这样得到算子方程

$$\frac{\partial F}{\partial t}+\mathcal{A}_F F=G\tag{3.8}$$

取空间步长为 h,时间步长为 Δt,在(x,t)空间布网$(mh,n\Delta t)$,记函数 F 在$(n\Delta t)$时刻的值为 F^n,在点$(mh,n\Delta t)$的值为 F_m^n。于是与式(3.8)相应的差分方程可写为

$$\frac{F^{n+1}-F^n}{\Delta t}+A_F^{(n+1,n)}\left[\theta F^{n+1}+(1-\theta)F^n\right]=G^{(n+1,n)}\tag{3.9}$$

或者改用

$$\frac{F^{n+1}-F^n}{\Delta t}+\theta A_F^{(n+1)}F^{n+1}+(1-\theta)A_F^nF^n=G^{(n+1,n)}\tag{3.10}$$

式中 $G^{(n+1,n)}=\theta G^{n+1}+(1-\theta)G^n$,$A_F$ 为与 $\mathcal{A}_F$ 相容的空间离散算子,A_F^n 和 A_F^{n+1} 分别表示在 t_n 和 t_{n+1} 时刻的 A_F 算子。此时,A_F 中的 F 分别取作 F^n 或 F^{n+1},而 $A_F^{(n+1,n)}$ 则表示当 F 取

F^n 和 F^{n+1} 的某种线性组合时的 A_F 算子。格式(3.9)为(推广)中点格式,由曾庆存等所提出(曾庆存等,1980a)。而格式(3.10)为(推广)梯形格式,当 $\theta=\dfrac{1}{2}$ 时,就是克兰克-尼科尔森(Crank-Nicolson)格式。

在我们所考虑的物理问题中,能量通常都是有限的。而且当 $G=0$ 时,能量一般不随时间增长:$\dfrac{\partial}{\partial t}\|F\|^2\leqslant 0$,即 $\tilde{A}$ 为非负算子:$(\tilde{A}F,F)\geqslant 0$。例如,流体动力学方程和传热过程方程等就具有此性质。为了系统地讨论差分方程及其解的稳定性问题,我们先引入 l_2 空间。在第 2 章中,我们介绍过 L^2 空间,这是一个连续函数空间。而 l_2 空间则是一个离散空间,它由 2 维向量、3 维向量、…、n 维向量组成。定义在 l_2 上的内积为

$$(F,G)_\rho=\sum_{m=1}^{n}\rho_m f_m g_m \tag{3.11}$$

式中 $F=(f_1,f_2,\cdots,f_n)$,$G=(g_1,g_2,\cdots,g_n)$ 为 l_2 中的任意两个同维的向量,$\rho_i>0$ 为对角矩阵 ρ 的对角元,ρ 称为权重系数矩阵。相应,l_2 上的范数定义为

$$\|F\|_\rho=\sqrt{(F,F)_\rho}=\sqrt{\sum_{m=1}^{n}\rho_m f_m^2} \tag{3.12}$$

有了 l_2 空间上内积和范数的定义,就可以研究类似式(3.9)和式(3.10)的差分格式了。此时,对于网格函数 F 和 G,其内积和范数就可以直接采用式(3.11)和式(3.12),只是其中的 ρ_m 恒取为空间步长 h 即可。这样内积可写成:$(F,G)=(F,G)_h=\sum\limits_{m=1}^{n}hf_m g_m$,而范数为 $\|F\|=\|F\|_h=\sqrt{(F,F)}=\sqrt{\sum\limits_{m=1}^{n}hf_m^2}$。下面给出非负算子和零算子的定义:

定义 3.1:如果算子 A 满足

$$(AF,F)\geqslant 0 \tag{3.13}$$

则称 A 为非负算子;当等号成立时,称 A 为零算子或广义反对称算子。

3.2 主要稳定性定理

在这一节里,我们先给出稳定性的定义,然后基于曾庆存等(1981a)的思路和方法给出相关的定理及其证明。

定义 3.2:若当 Δt 足够小时,由差分格式(3.9)得到的解满足

$$\|F^{n+1}\|\leqslant[1+0(\Delta t)]\|F^n\|+\Delta t\|G^{(n+1,n)}\| \tag{3.14}$$

则称差分格式是计算稳定的。

显然当 $\|F^{n+1}\|\leqslant\|F^n\|$ 或 $\|F^n\|\leqslant c$(大于零的常数)时,格式必定是计算稳定的。

定理 3.1:若 $A_F^{(n+1,n)}$ 为非负算子,则当 $\dfrac{1}{2}\leqslant\theta\leqslant 1$ 时,格式(3.9)是无条件计算稳定的。

证明:令 $F^{(n+1,n)}=\theta F^{n+1}+(1-\theta)F^n$,用 $F^{(n+1,n)}$ 与式(3.9)作内积,则得

$$\theta\|F^{n+1}\|^2=(1-\theta)\|F^n\|^2-(1-2\theta)(F^n,F^{n+1})$$

$$-\Delta t(A_F^{(n+1,n)}F^{(n+1,n)},F^{(n+1,n)})+\Delta t(G^{(n+1,n)},F^{(n+1,n)})$$

因 $A_F^{(n+1,n)}$ 非负,则$(A_F^{(n+1,n)}F^{(n+1,n)},F^{(n+1,n)})\geqslant 0$。另外,

$$\begin{aligned}(G^{(n+1,n)},F^{(n+1,n)})&\leqslant\|G^{(n+1,n)}\|\cdot\|F^{(n+1,n)}\|=\|G^{(n+1,n)}\|\cdot\|\theta F^{n+1}+(1-\theta)F^n\|\\&\leqslant\|G^{(n+1,n)}\|\cdot(\theta\|F^{n+1}\|+(1-\theta)\|F^n\|)\end{aligned}$$

再由$\frac{1}{2}\leqslant\theta\leqslant 1$可知$1-2\theta\leqslant 0$,于是有

$$\begin{aligned}\theta\|F^{n+1}\|^2&\leqslant(1-\theta)\|F^n\|^2-(1-2\theta)(F^n,F^{n+1})+\Delta t(G^{(n+1,n)},F^{(n+1,n)})\\&\leqslant(1-\theta)\|F^n\|^2-(1-2\theta)(\|F^n\|\cdot\|F^{n+1}\|)+\Delta t(G^{(n+1,n)},F^{(n+1,n)})\end{aligned}$$

整理得

$$\begin{aligned}(\|F^{n+1}\|-\|F^n\|)\cdot(\theta\|F^{n+1}\|+(1-\theta)\|F^n\|)&\leqslant\Delta t(G^{(n+1,n)},F^{(n+1,n)})\\&\leqslant\Delta t\|G^{(n+1,n)}\|\cdot(\theta\|F^{n+1}\|+(1-\theta)\|F^n\|)\end{aligned}$$

由于$\theta\|F^{n+1}\|+(1-\theta)\|F^n\|>0$,因此有$\|F^{n+1}\|-\|F^n\|\leqslant\Delta t\|G^{(n+1,n)}\|$,即$\|F^{n+1}\|\leqslant\|F^n\|+\Delta t\|G^{(n+1,n)}\|$。$\frac{1}{2}\leqslant\theta\leqslant 1$时的计算稳定性得到证明。

注:若$(A_F^{(n+1,n)}F,F)=0$,且$0\leqslant\theta<\frac{1}{2}$,则格式(3.9)绝对不稳定。

定理 3.2:若 $G\equiv 0$,且$(A_F^{(n+1,n)}F,F)=0$,则格式(3.9)满足

$$\|F^{n+1}\|^2=\|F^n\|^2+(1-2\theta)\Delta t^2\left\|\frac{F^{n+1}-F^n}{\Delta t}\right\|^2 \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}&[\|F^{n+1}\|^2+\theta^2\Delta t^2\|A_F^{(n+1,n)}F^{n+1}\|^2]\\&-[\|F^n\|^2+\theta^2\Delta t^2\|A_F^{(n+1,n)}F^n\|^2]=(1-2\theta)\Delta t^2\|A_F^{(n+1,n)}F^n\|^2\end{aligned} \tag{3.16}$$

当取$\theta=\frac{1}{2}$时,有

1)"总能量守恒":$\|F^n\|^2=\|F^0\|^2$ (3.17)

满足总能量守恒式(3.17)的差分格式(3.9)称为平方守恒格式;

2)"广义尺度守恒":$\|A^{(n+1,n)}F^{n+1}\|^2=\|A_F^{(n+1,n)}F^n\|^2$; (3.18)

若 F^0 不为常数,当$\theta<\frac{1}{2}$时则有

"总能量增长":$\|F^{n+1}\|^2>\|F^n\|^2$ (3.19)

而当$\theta>\frac{1}{2}$时,则有

"总能量衰减":$\|F^{n+1}\|^2<\|F^n\|^2$ (3.20)

证明:

$$(F^{n+1}-F^n,F^n)=\frac{1}{2}\left[\|F^{n+1}\|^2-\|F^n\|^2-\Delta t^2\left\|\frac{F^{n+1}-F^n}{\Delta t}\right\|^2\right] \tag{3.21}$$

$$(F^{n+1}-F^n,F^{n+1})=\frac{1}{2}\left[\|F^{n+1}\|^2-\|F^n\|^2+\Delta t\left\|\frac{F^{n+1}-F^n}{\Delta t}\right\|^2\right] \tag{3.22}$$

由$(1-\theta)$和 θ 分别乘式(3.21)和式(3.22),相加即得