算不准原理及其意义与启示

李建平*

（大气物理研究所　北京　100029）

关键词　算不准原理，普适关系，最优步长，最大有效计算时间，最优计算

算不准原理这个名词使人们自然联想到量子力学中的测不准原理。事实上，这两者在形式上虽极为类似，内涵上却有所不同。前者反映的是微分方程数值计算中由数值方法的不准确所导致的不确定性和由机器的有限精度所造成的不确定性之间的关系，而后者反映的是量子力学中量子的位置测量的不确定性和动量测量的不确定性之间的关系。中国科学院大气物理研究所的有关研究小组经过几年来艰苦的探索性研究，通过大量的数值试验和严格的数学分析，取得创造性的成果，发现两个普适关系，提出了算不准原理。这个原理不仅对非线性微分方程的长时间数值积分的可靠性提出了挑战，而且对微分方程数值计算本身也有重要的指导意义。中国科学院大气物理研究所大气科学和地球流体力学国家重点实验室在 2000 年度国家重点实验室验收中荣获生物地学口第一名时，这方面的成果被评价为创新性成果，同时被列为中国科学院知识创新成果之一。它的详细结果和证明在 *Science in China*(Ser.E)2000 年第 5 期、第 6 期上作为首篇论文报道。

1　算不准原理

数值试验和理论分析表明，方法误差（离散化误差）和舍入误差随步长的变化是反向的，这就导致了与量子力学中著名的 Heisenberg 测不准原理相类似的算不准原理。其数学表达式是

$$\Delta e + \Delta r \geq C,$$
$$\Delta e \cdot \Delta r \geq \eta,$$

其中 $\triangle e$ 代表数值方法的不准确所带来的不确定性的度量，$\triangle r$ 代表机器的有限精度所造成的不确定性的度量，C 和 η 当机器精度有限时为正数。具体地说，如果把离散误差和舍入误差看作是“共轭”量，那么，算不准原理意味着，若其中之一的不确定性越小，则它的“共轭”量的不确定性就越大。换句话说，在数值积分中存在两个基本的限制，一方面是由于数值方法求解的稳定性条件要求时间步长有一个上界限制，而另一方面是由于实际执行这种计算的计算机又

---

* 大气物理研究所副研究员

收稿日期：2000 年 9 月 29 日

有精度限制,从而为使误差不致累积过大而必然对计算步数带来一个上界限制。这两个限制是相互矛盾的,其结果就必然导致算不准原理。

由于数值解法和计算机所带来的上述两种不确定性之间存在的固有关系,使得有效数值解的区间长度受到限制,这是造成最大有效计算时间和最优步长必然存在的根源。因此,当机器精度给定时,数值方法所得数值解能够达到的最好准确度就已完全确定。就是说,若给定误差容限 $\delta>0$(即误差小于这个容限的数值解是可接受的),那么必然存在最大有效计算时间 T,在区间[0, T]内数值解满足这个容限的要求并把真解较好地再现出来,而在这个区间之外的真解是数值方法无法确定的。所以,在机器精度是有限的这一固有属性下,算不准原理给数值算法的计算能力加上了确定的限制。

2 两个普适关系

数值试验和理论分析也表明存在两个普适关系,它们仅仅依赖于机器精度和数值方法的阶,而与微分方程、初值和数值格式无关。它们是

$$l=\frac{H_1}{H_2}=10^{\frac{\Delta n}{p+0.5}}, \qquad 1$$

$$k=\frac{C(T_2)}{C(T_1)}=l^p, \qquad 2$$

其中 H_1, H_2,分别是同一种 p 阶的 k 步法分别在具有 n_1, n_2 位有效数字的两种机器精度 γ_1, γ_2 ($\gamma_1=5\times10^{-n_1}, \gamma_2=5\times10^{-n_2}, n_1\le n_2$)下的最优步长,$C(T_1)$,$C(T_2)$是两种机器精度下的最大有效计算时间函数,$\triangle n=n_2-n_1$。由普适关系 2 可以推得

$$\Delta T=\hat{C}\cdot p\ln l$$

其中$\triangle T=T_2-T_1$,$\hat{C}$ 是一个正数,T_1, T_2 是两种机器精度下的最大有效计算时间。

这两个关系有非常重要的意义和实用价值,它们揭示出一个数值方法在任何两种机器精度下的两个最优步长之间和两个最大有效计算时间之间的本质联系。根据这两个关系,只要知道某一机器精度下数值方法的最优步长和最大有效计算时间,就可以推得任何机器精度下的最优步长和最大有效计算时间。

3 逐步调整的最优计算方法

在设计数值模式时,我们总希望能实现最优数值计算。这里,最优是针对计算准确性而言的;最优数值计算就是使某一数值方法按照它所能达到的最佳准确性进行计算。给定微分方程和数值方法,那么时空分辨率和机器精度就是决定其最佳准确性的主要参量。根据算不准原理提出一种逐步调整的最优计算方法,其具体实现过程框图见图 1。数值试验表明,这种方

法是实现最优数值计算的一个有效方法。可以预料,这种方法必将在实际的数值计算中得到广泛的应用。

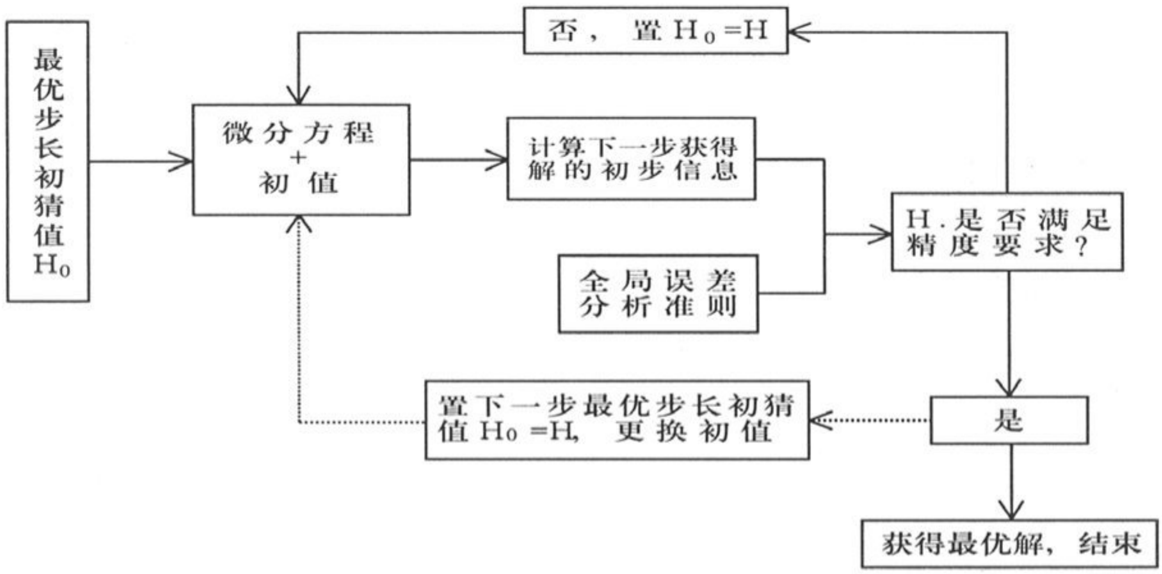

图1 逐步调整的最优计算方法具体实现过程框图

4 几点启示

(1) 在现实当中,算不准原理指出计算机的有效模拟能力是有限度的。这个界限的存在性是固有的,是不依赖于所模拟的对象的(确切地说是除去一个零测度集),但这个界限的大小常常与模拟的对象有关。(2) 可以利用算不准原理使模拟达到最好程度。算不准原理一方面指出了模拟能力的限度,另一方面又指出了最优关系。这个最优关系给出达到最好模拟能力的途径。(3) 发展高精度的计算机是提高有效计算能力的一条重要途径。目前对于微分方程的各种数值解法,其核心都是步进式的递推过程,而这种方法必然存在最大有效积分时间,超过这个时间的积分结果将是无效的,从而不能对系统长期行为做出正确的分析。而根据算不准原理,只要增加机器精度就可以延长最大有效计算时间,从而提高有效计算能力。(4) 对误差的累积效应和长时间的影响应给予足够的认识。这正是我们目前所缺乏的。事实上,由于大型、超大型计算机能够进行各种大量计算,使得这个问题越加突出出来。

总之,目前正面临着从无限精度理想化向有限精度现实性的观念转变,在这个转变过程中,如何冲破在有限机器精度下的算不准原理并提高长时间数值计算能力,则是急需解决的重要课题。