

高階正定義半拉格朗日與尤拉平流格式之探討

黃清勇

國立中央大學 大氣物理研究所

摘要

本文系統性比較正定義高階半拉格朗日與尤拉平流格式的表現。大體來說，利用四階多項式插分或三次的滑弧插分的通量型式的尤拉格式，不論於旋轉氣流及變形氣流測試，其表現均屬良好。我們發現通量型式(*flux form*)的格式，基本上其數值表現與高其一階的平流型式(*advective form*)的格式約相當。高階通量型式的格式絕對保守質量，但高階平流型式的格式卻不行，必須將平流後的質量重新調整。為此，本文提出曲線重塑法(*body reshaping*)，不僅將質量場正定化，亦絕對保守總質量。本文發現使用質量調整的七階半拉格朗日格式，其表現均較四階通量型式的尤拉格式好很多。因為半拉格朗日格式可使用遠大於尤拉格式的積分時間間距，因此我們認為五階的半拉格朗日格式應可代替四階通量型式的尤拉格式。

一、前言

正定義平流格式(positive definite advection scheme)對數值天氣預報來說是很重要的一環，舉凡水汽、雲水、雨水、亂流動能及其它正定義場的平流過程之數值模擬皆須依賴良好的正定義格式。近年來，已有許多數值研究學者提出不同的正定義平流格式，如Smolarkiewicz利用反擴散聚集質量的二階格式(1983)及四階格式(1986)，Bott(1989)利用拉格朗日(多項式)插分法的四階格式，以及Emde(1992)利用三次滑弧(cubic spline)插分的NICE格式。上述方法均為尤拉通量式(*flux form*)，當流場為非輻散時，嚴格保守正定義量之總量，且因採用高階演算，於各類流場測試均得到遠較一階上游法(此法因採線性插分，自具正定義性質)為優。相對於其它同階尤拉平流式(*advective form*)，尤拉通量式有較好的表現，但二者在穩定度上均受限於科忍數(Courant number)不能大於一。另一方面，半拉格朗日格式(semi-Lagrangian scheme)卻能突破此一限制，真實測試時使用數倍於尤拉格式的科忍數亦能得到相似的表現。由於半拉格朗日法自具平流式，其高階格式在數學上不能保有正定義性質，因此應用於正定義平流時，無法保守總質量。本文主要有兩個目的，一為提出保守總質量的方法並將之用於半拉格朗日格式，另為將Bott及Emde的尤拉格式與高階半拉格朗日格式作系統性的測試與比較。

二、平流格式

本文探討的尤拉平流格式為最近文獻提出的方法，其數學型式與詳細的導出過程請參閱Bott(1989)

與Emde(1992)。

Bott的演算法可分成兩個步驟：(1)利用拉格朗日(即多項式)插分法得到平流通量，並乘上權重係數以使格式滿足平移條件(亦即當科忍數為1時，格式無數值誤差)，此過程為非線性常模化(nonlinear renormalization)；(2)對積分通量加以限制以使演算正定化，並由格式的通量型式滿足質量保守，此過程可稱為格式內正定化。目前Bott的格式僅測試到其四階格式。

NIC(Emde, 1992)的演算法則利用三次的滑弧插分法求得通量，因為三次插分不能避免產生負值，因此使用於非正定平流。NICE乃為extended NIC演算法，將平流場限制為正，並局部性破壞滑弧的連續性，再修正通量值，最後質量保守可由格式的通量型式得到滿足。此NICE演算法亦為格式內正定化。

半拉格朗日演算法利用平流格式的物理特性，該計算點的平流新值為其對應出發點的值。找到出發點位置，則可利用各類滑弧插分法或拉格朗日插分法，求得該點的值。若使用三次滑弧法或高階多項式插分法，則出發點的值不能保證為正。但由於出發點的值總是與相關網格點內插得來，故數值上其科忍數之限制遠較尤拉法為小。有關半拉格朗日格式的細節可見於Huang(1994)。

一般而言，滑弧插分法及多項式插分法具保守總動量的性質，且越高階的半拉格朗日格式於非正定平流中產生的負值質量越小(當然一階的上游法，即線性插分不會產生負值)。在正定平流中，若將負值設為零，則總質量自然會增加，雖然許多使用者發現平流場於多次自旋後，其質量誤差仍很小。Huang(1994)發現於變形氣流測試，七階的半拉格朗日格式於短期積分後，其質量累積已不容忽視。使用一階插分法於非正值區(及所謂通量校正方法)，僅能降低低階格式的

負值頻散，仍無法改善高階格式的質量保守程度。因此，在嚴峻的要求下，半拉格朗日格式不能直接用於複雜氣流的正定義平流。

格式內正定化與質量守恆對半拉格朗日格式而言是非常困難的，因為吾人無法如尤拉法對單一計算點的變異量進行有效的限制。因此，我們採取於質量場平流後的總量控制策略(即格式外的正定化)，其步驟如下：

1、計算正值網格點數與負值區總量，並設定負值為零。

2、質量修正量 = 平流前總質量 - 平流後總質量 + 負值區總量。

3、新正值區網格點值 = 原正值區網格點值 + 質量修正量除以正值網格點數。

4、重覆步驟1至3，直到質量修正量小於設定的微小值。

在此，重覆修正的目的旨在達到和緩的曲線調整，每一次正值網格點的微調可能產生微小的負值，但經一再重塑後，此負值的量度將越來越小。一般而言，僅須進行3—5次即已足夠，其計算消耗時間甚少。由於微調過程乃均勻地對每一正值網格點進行，因此不會製造非對稱性。對越高階的插分法而言，由於其負值頻散越小，質量調整的效率也越好。此質量調整可應用於任何平流格式，亦可採一維或二維方式進行。半拉格朗日格式因可使用一維或多維滑弧插分法與多項式插分法，此質量調整的方法對其相當有利，在多維平流中，可於水平平流後先作二維調整，再進行垂直平流後的一維調整。而目前通量型式的尤拉法則必須使用分時(time-splitting)積分以進行單維通量控制而達到質量守恒。

三、測試結果

首先進行的測試為旋轉氣流測試。模擬的範圍為 100×100 網格點， $\Delta x = \Delta y = 1$ 。我們將一半徑 $5\Delta x$ 的圓錐置於 $(x, y) = (50, 75)$ 繞行於旋轉中心 $(50, 50)$ ，氣旋式繞流的角速度為0.1。初始的圓錐中心最大高度為3.87。表1為旋轉流場測試結果。當積分時距 $\Delta t = 0.1$ ，積分次數 $N = 3768$ 時，此圓錐繞行六圈。對半徑 $5\Delta x$ 的圓錐而言，BOTT與NICE的表現約略相當，於繞轉六圈後約保有六成的圓錐中心高度。由於NICE使用三次滑弧插分法，對小於 $4\Delta x$ 半徑的圓錐而言，其表現將比BOTT稍好。此即對短波的保持，三次滑弧插分法要比四次拉格朗日插分法佳，因為後者無法享有四階準度。但對較長波而言，三次滑弧插分法要比四次拉格朗日插分法差一點，蓋前者僅具三階準度。

在相同的積分條件下，應用質量調整以達成正定義值的三次滑弧插分的半拉格朗日格式(CSPP)與五階多項式插分的半拉格朗日格式(SL5P)，二者的表現則稍遜於BOTT與NICE。但CSP與SL5(無質量保守限制)，

二者表現則略優於BOTT與NICE，雖然亦伴隨微小的負值。可見加入質量保守的限制影響原始格式其它的表現。不論CSPP與SL5P，當使用 $\Delta t = 0.4$ ，積分次數942，二者的表現均明顯優越於BOTT與NICE。因此半拉格朗日格式的表現不因使用較大的科忍數而降低，反而因總運算次數的減少而降低數值截斷誤差的累積。

七階多項式插分的半拉格朗日格式SL7與SL7P，二者的表現均遠優於上述格式。SL7P則略遜於SL7。於繞六圈後仍得到約八成的圓錐中心高度。圖1所示為SL7P($\Delta t = 0.1, N = 3768$)的結果。圖2為SL5P($\Delta t = 0.4, N = 942$)與SL7P($\Delta t = 0.4, N = 942$)的結果，二者雖然使用 $\Delta t = 0.4$ ，相位與振幅的保持並未受到不利的影響，不論圓錐中心位置與形狀均十分忠實。圖3為使用BOTT與NICE，圓錐繞行六圈的結果。雖然圓錐中心位置正確，但其形狀已不是十分對稱，中心高度值亦不如圖2中SL5P與SL7P的結果。

下一個平流測試為較嚴厲的變形氣流場測試。此變形氣流是非輻散的，其具有的流線函數可表示為 $\psi(x, y) = 8\sin(\pi x / 25)\cos(\pi y / 25)$ 。我們將一半徑15 Δx 、中心高度值為3.87的圓錐放置於網格中心 $(x, y) = (50, 50)$ 。表2為變形氣流場的測試結果。圖4示BOTT($\Delta t = 0.7, N = 3768$)與NICE($\Delta t = 0.7, N = 3768$)的質量分布。在此測試，BOTT產生輕微的不穩定，可由圖4清楚看到。NICE由表1看來似亦有不穩定，但於圖2並未顯示。進一步分析發現，表2中NICE的不佳結果乃肇因於邊界附近 $(50, 99)$ 產生不穩定值(未在圖4範圍)。此不穩定並未出現於Ende(1992)的圖8。去除此區不穩定值後，則二者結果幾乎相同，得到最大值比為0.24。Easter(1993)改良原始Bott格式，使其於變形氣流測試中是穩定的，其結果與圖4中NICE類似。

所有半拉格朗日格式經質量調整後，均絕對保守正定義質量。雖然模擬氣流為強烈變形氣流，曲線重塑於五次內即可收斂。CSP或CSPP於此測試中則顯示出最差的結果，詳細原因於Huang(1994)中已說明，不再贅述。CSPP雖去除CSP的強烈不穩定，但其總能量比不及一成，顯然不值採信。SL5與SL7在此測試中雖然使用 $\Delta t = 2.8$ ，其積分均為穩定。值得注意的是，當 Δt 增加為2.8時，SL5P與SL7P的表現似未變差，但亦未如旋轉氣流測試中變好。圖5為SL5P($\Delta t = 0.7, N = 3768$)與SL7P($\Delta t = 0.7, N = 3768$)的質量分布。對照於圖4，SL5P與NICE得到相同的最大值比(0.24)，前者的蛋杯稍為深一點，但其質量較後者有較大的主杯外擴散現象。SL7P則有最佳的最大值比(0.28)，杯外擴散現象與SL5P類似。此外，吾人可見圖4中NICE的蛋杯幾已被填平，但圖5中SL7P的蛋杯仍顯示若干螺旋狀。這對使用平流式的格式而言，是難能可貴的。Staniforth et al. (1987)指出此強烈的變形氣流具有尺度崩潰現象(scale collapse)，任何格式的長期積分均無法解析其次網格演化。若此測試為非正定平流，Tremback et al. (1987)顯示任何階數的通量型式的尤拉格式具有強烈的局部不穩定。參見於Huang(1994)的圖8所示SL7於

非正定平流的表現(或可由表2)，本文所提出的曲線重塑法不僅維持了質量保守，亦去除負值區的擴散現象。

四、結語

本文系統性比較正定義高階半拉格朗日與尤拉平流格式的表現。大體來說，利用四階多項式插分或三次的滑弧插分的通量型式的尤拉格式，不論於旋轉氣流及變形氣流測試，其表現均屬良好。本文並未測試 Smolarkiewicz 的四階格式，但此格式仍為通量型式的尤拉格式，其表現應與 Bott 的四階格式相當。我們發現通量型式的格式，其數值表現基本上與高其一階的平流型式的格式約相當。但通量格式須處理兩個側區的通量(即須作兩個插分)，平流型式格式僅須對出發點作一個插分。高階通量型式格式絕對保守質量，但高階平流型式格式卻不行，必須將平流後的質量重新調整。為此，本文提出曲線重塑法，不僅將質量場正定化，亦可絕對保守總質量。高階通量型式的格式於多維氣流下須透過分時積分以絕對保守質量，但曲線重塑可一維調整或二維調整。另外，通量型式格式最好使用於非輻散氣流，平流型式格式則無此限制。模擬經驗指出於輻散氣流場，一般而言平流型式的格式其表現較通量型式的格式佳(Crowley, 1968)。本文發現使用質量調整的七階半拉格朗日格式，不論於旋轉氣流及變形氣流測試，其表現均較四階通量型式的尤拉格式好很多。因為半拉格朗日格式可使用遠大於尤拉格式的積分時間間距，因此我們認為五階的半拉格朗日格式應可代替四階通量型式的尤拉格式。未來我們將發展 Bott 的六階尤拉格式，並與七階半拉格朗日格式比較。

致謝

感謝張良輝博士提供 BOTT 與 NICE 的程式。本文在國科會計畫的贊助下得以完成。

參考文獻

Bott, A., 1989: A positive definite advection scheme

obtained by nonlinear renormalization of the advective fluxes. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 1006-1015.

Crowley, W. P., 1968: Numerical advection experiments.

Mon. Wea. Rev., **96**, 1-11.

Easter, R. C., 1993: Two modified versions of Bott's

positive-definite numerical advection scheme.

Mon. Wea. Rev., **121**, 297-304.

Emde, K. V. D., 1992: Solving conservation laws with

parabolic and cubic splines. *Mon. Wea. Rev.*, **120**, 482-492.

Huang, C. Y., 1994: Semi-Lagrangian advection schemes and Eulerian WKL algorithms. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 1647-1658.

Smolarkiewicz, P. K., 1983: A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 479-486.

Smolarkiewicz, P. K., and T. L. Clark, 1986: A fully multidimensional positive definite advection transport algorithm: Further development and applications. *J. Comput. Phys.*, **67**, 396-438.

Staniforth, A., J. Côté, and J. Pudykiewicz, 1987: Comments on "Smolarkiewicz's deformational flow." *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 894-900.

Tremback, C. J., J. Powell, W. R. Cotton, and R. A. Pielke, 1987: The forward-in-time upstream advection scheme: Extension to higher orders. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 540-555.

表1、圓錐（半徑 $5\Delta X$ ）的旋轉流場測試。

格式	積分時距	積分次數	最小值比	最大值比	總質量比	總能量比
BOTT	0.1	3768	0.	0.632	1.000	0.702
NICE	0.1	3768	0.	0.631	1.000	0.681
CSPP	0.1	3768	0.	0.597	1.000	0.641
SL5P	0.1	3768	0.	0.576	1.000	0.623
SL7P	0.1	3768	0.	0.780	1.000	0.845
CSPP	0.4	942	0.	0.734	1.001	0.798
SL5P	0.4	942	0.	0.726	1.000	0.790
SL7P	0.4	942	0.	0.835	1.000	0.910
CSP	0.1	3768	-0.036	0.641	1.000	0.767
SL5	0.1	3768	-0.036	0.643	1.000	0.805
SL7	0.1	3768	-0.026	0.811	1.000	0.957

最小值比 = 所有網格點之最小值除以初始圓錐中心高度。

最大值比 = 所有網格點之最大值除以初始圓錐中心高度。

總質量比 = 所有網格點值之總和除以其初始總和。

總能量比 = 所有網格點值平方之總和除以其初始總和。

表2、圓錐（半徑 $15\Delta X$ ）的變形流場測試。

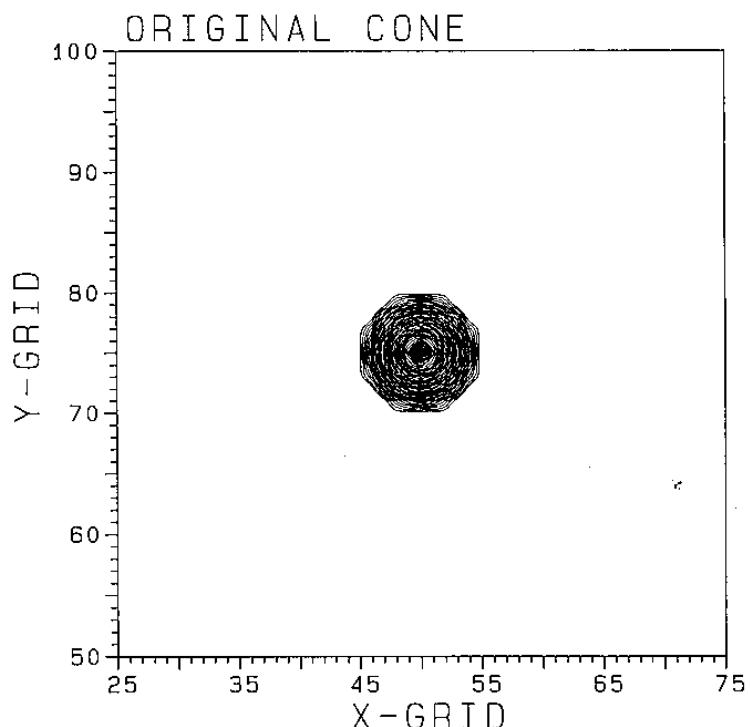
格式	積分時距	積分次數	最小值比	最大值比	總質量比	總能量比
BOTT	0.35	7536	0.	1.305	0.986	1.642
BOTT	0.70	3768	0.	2.072	0.993	2.706
NICE	0.35	7536	0.	3.928	0.984	0.591
NICE	0.70	3768	0.	4.640	0.981	0.686
CSPP	0.70	3768	0.	0.109	1.000	0.090
SL5P	0.70	3768	0.	0.240	1.000	0.291
SL7P	0.70	3768	0.	0.279	1.000	0.315
SL5P	2.80	942	0.	0.222	1.000	0.286
SL7P	2.80	942	0.	0.251	1.000	0.307
SL5	2.80	942	-0.318	0.470	1.497	1.606
SL7	2.80	942	-0.533	0.703	1.609	2.997

最小值比=所有網格點之最小值除以初始圓錐中心高度。

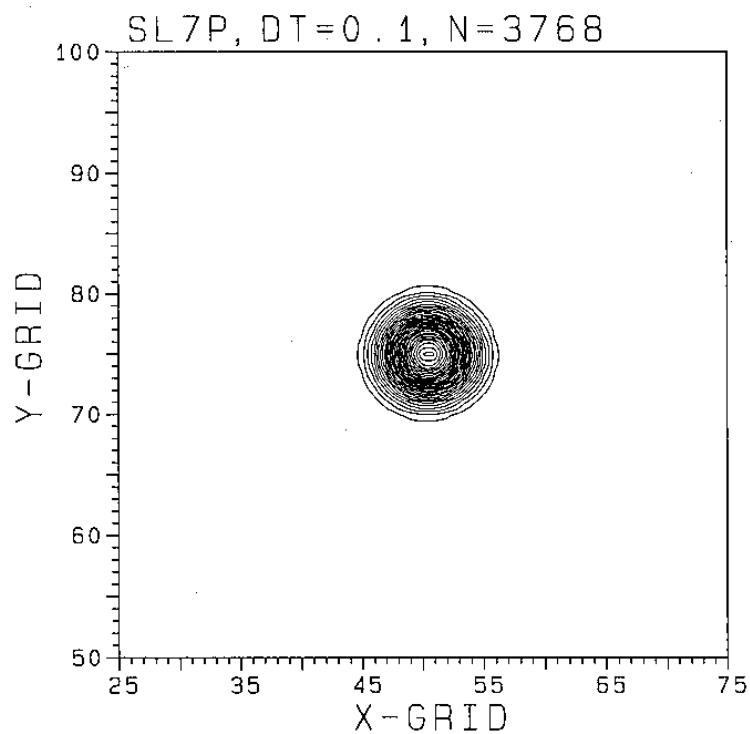
最大值比=所有網格點之最大值除以初始圓錐中心高度。

總質量比=所有網格點值之總和除以其初始總和。

總能量比=所有網格點值平方之總和除以其初始總和。

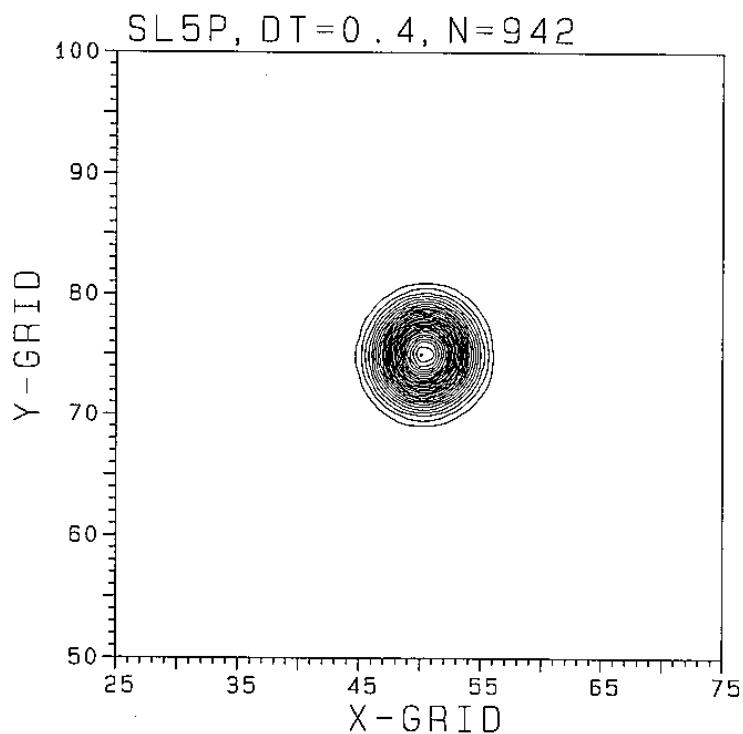


CONTOUR FROM 0.000 TO 3.800 WITH CONTOUR INTERVAL 0.100

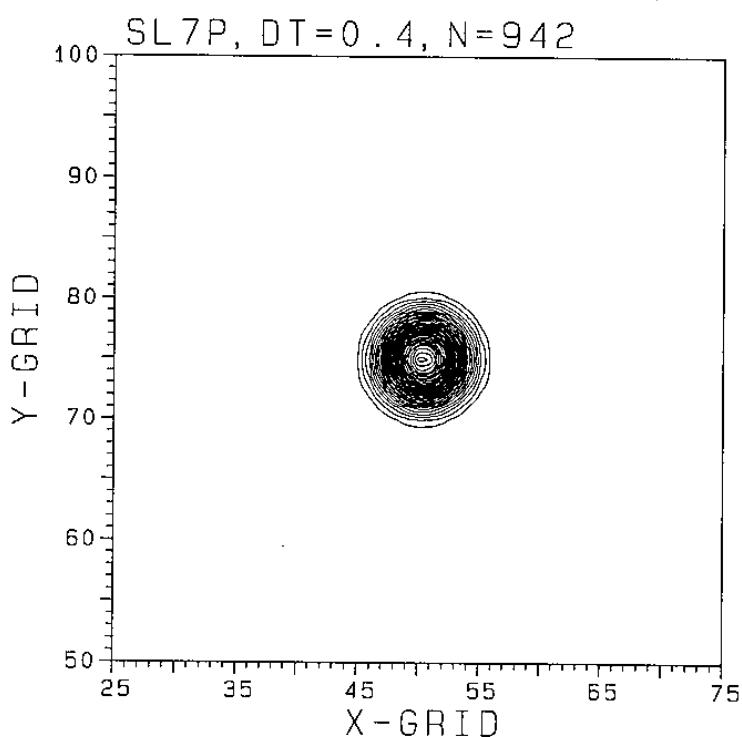


CONTOUR FROM 0.000 TO 3.000 WITH CONTOUR INTERVAL 0.100

圖1、(a)初始圓錐，中心高度為3.87；(b)SL7P，使用 $\Delta t=0.1$ ，繞行6圈。



CONTOUR FROM 0.000 TO 2.800 WITH CONTOUR INTERVAL 0.100



CONTOUR FROM 0.000 TO 3.200 WITH CONTOUR INTERVAL 0.100

圖2、(a)SL5P，使用 $\Delta t=0.4$ ，繞行6圈；(b)同(a)但為SL7P。

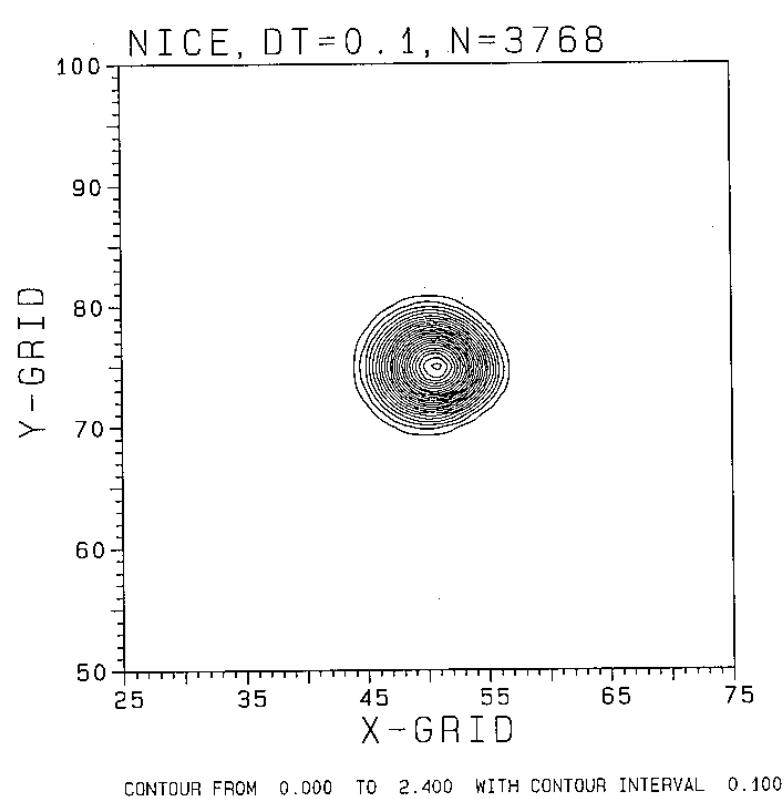
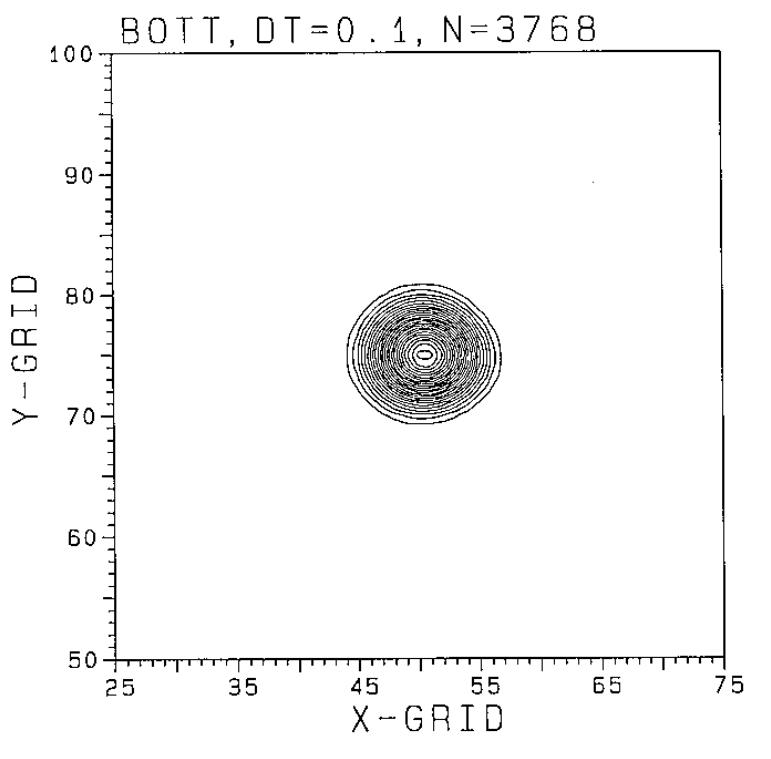
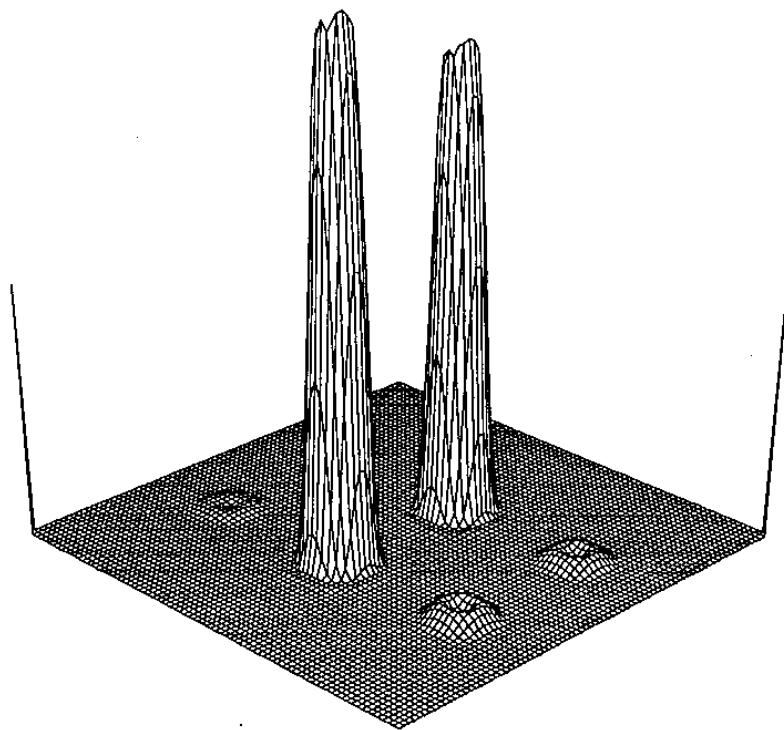
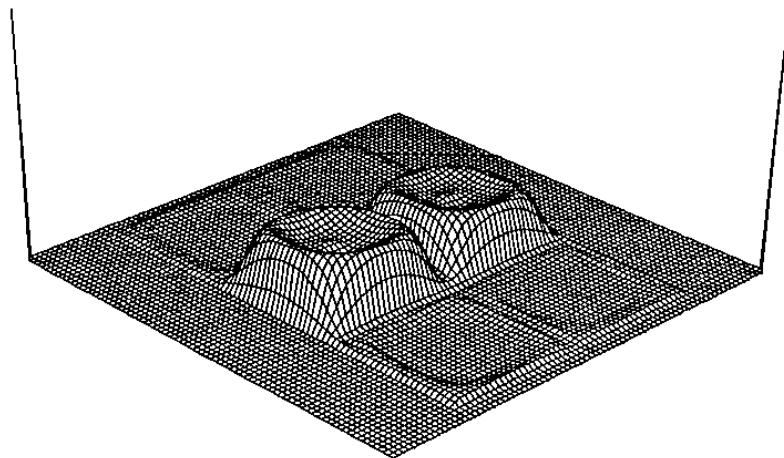


圖3、(a)BOTT，使用 $\Delta t=0.1$ ，繞行6圈；(b)同(a)但為NICE。

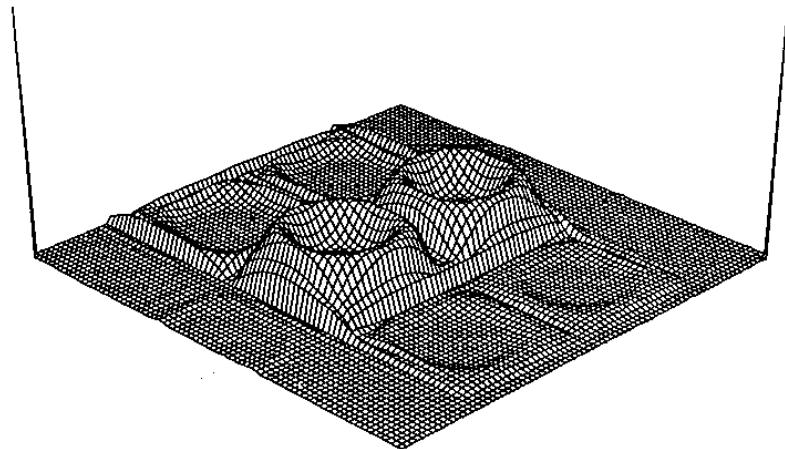


BOTT, DT=0.7, N=3768

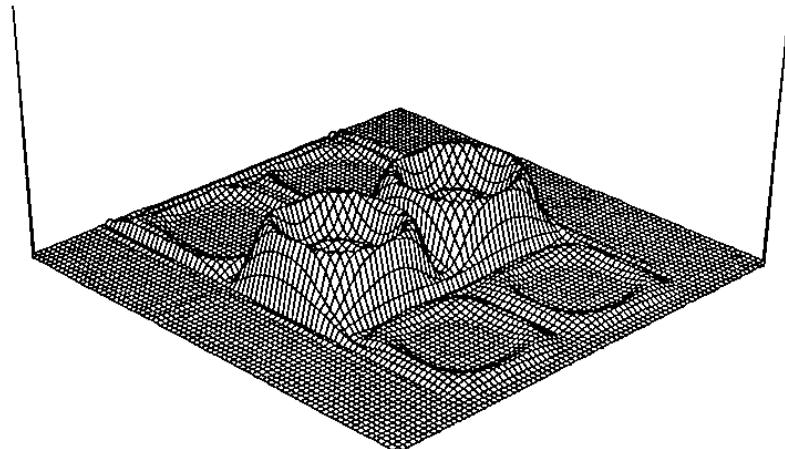


NICE, DT=0.7, N=3768

圖4、(a)BOTT於變形氣流測試，使用 $\Delta t=0.7$ ，積分3768次；(b)同(a)但為NICE。
圖示僅為內圈 81×81 ，兩個參考角柱為初始圓錐中心高度。



SL5P, DT=0.7, N=3768



SL7P, DT=0.7, N=3768

圖5、(a)SL5P於變形氣流測試，使用 $\Delta t=0.7$ ，積分3768次；(b)同(a)但為SL7P。