

GRAPES 模式中高精度正定保形物质平流方案的研究 I :理论方案设计与理想试验^{* 1}

沈学顺¹ 王明欢² 肖 锋³

SHEN Xueshun¹ WANG Minghuan² XIAO Feng³

1. 中国气象局数值预报中心,北京,100081

2. 中国气象局武汉暴雨研究所,武汉,430074

3. 日本东京工业大学能量科学系,日本横滨,226-8502

1. *Numerical Prediction Center of CMA, Beijing 100081, China*

2. *Institute of Heavy Rain, CMA, Wuhan 430074, China*

3. *Department of energy sciences, Tokyo Institute of Technology, Yokohama 226-8502, Japan*

2009-11-13 收稿,2010-03-10 改回.

Shen Xueshun, Wang Minghuan, Xiao Feng. 2011. A study of the high-order accuracy and positive-definite conformal advection scheme in the GRAPES model I : Scientific design and idealized tests. *Acta Meteorologica Sinica*, 69(1):1-15

Abstract Accuracy of transport scheme has an important influence on the performance of a numerical weather prediction (NWP) model. How to develop a high-accuracy scalar transport scheme is of significance in improving the accuracy of the semi-Lagrangian model. This study applies a new high-order accuracy and positive-define conformal advection scheme into a semi-Lagrangian model by using the cell-integrated scheme. It not only remains the large time step and high computational efficiency of the semi-Lagrangian time integration scheme, but also gives scope to the new advection scheme's advantages of high-order accuracy and positive define conformal computation. The new scalar advection scheme, named the Piecewise Rational Method (PRM), is a deformation of the existing high-order Godunov scheme based on the piecewise rational function. This scheme is simple, practical and easy to program. It also can keep the scalar variables conservative in the advection process. The one- and two-dimensional ideal experiments were designed to test the PRM scheme. It is found that the PRM has great ability in treating the large spatial variations compared with the PPM (Piecewise Parabolic Method) and the cubic-Lagrangian interpolation method. The dissipation error of the PRM is smaller than that of the cubic-Lagrangian interpolation scheme. The PRM is much similar to the PPM with almost the same advection effect. But the PRM makes use of the convexity preserving nature of the rational function, and avoids the adjustments of the cell-interface values to enforce the monotonicity in the PPM. In addition, another ideal experiments were designed where the PRM is applied in place of the original water substances advection scheme utilized in the GRAPES model in the spherical coordinate system. The result further shows the advantages of the PRM and its feasibility in the GRAPES.

Key words Advection, Semi-Lagrangian, High-order accuracy, Positive-define conformal

摘 要 平流计算的精度对数值模式的结果有着重要影响。如何在半拉格朗日模式中发展高阶精度的标量平流计算方案是提高半拉格朗日数值模式精度的重要问题。文中采用计算流体力学中一个新的高精度正定保形的物质平流方案,通过映射单元格方法将其与半拉格朗日模式结合起来,既保留了半拉格朗日时间积分方案中积分时间步长大、计算效率高的特点,又

* 资助课题:国家 973 项目“我国南方致洪暴雨监测与预测的理论和研究方法研究”(2004CB418306)、国家科技支撑计划“灾害天气精细数值预报系统及短期气候集合预测研究”(2006BAC02B02)和自然科学基金面上项目(40675063)。

作者简介:沈学顺,主要从事数值模拟研究。E-mail:shenxs@cma.gov.cn

通讯作者:王明欢,主要从事数值模拟研究。E-mail:minghuanw@163.com

发挥新方案高精度正定保形的平流计算优势。该新的标量平流方案是基于分段有理函数的高阶 Godunov 方案的变形,称之为 Piecewise Rational Method (PRM)。此方案简单、实用,易于编程,可保持平流物理量的守恒。通过一维、二维理想试验,并与 PPM(Piecewise Parabolic Method)和采用三次插值的半拉格朗日方案试验结果对比分析,表明物质平流方案对于空间变化幅度大的物理量具有较高的平流计算能力。与三次拉格朗日插值相比,物质平流方案的耗散性更小。与 PPM 方案相比,两者有不少相似之处,平流效果也几乎相当,但物质平流方案中采用的有理函数的保凸特性,且不需要界面值调整,在实现上相对简单。另外,通过将物质平流方案应用到 GRAPES 模式中的球面坐标系下的理想试验,进一步确认了物质平流方案的优点及在 GRAPES 模式中的可行性。

关键词 平流, 半拉格朗日, 高精度, 正定保形

中图法分类号 P456.7

1 引言

平流是大气运动的基本过程。针对平流计算方案的研究一直是研究发展数值模式的重要内容。平流计算的精度对数值模式的结果有着重要影响。在大气数值模式中,通常要求解一些标量(如水汽等)的平流输送方程,这些标量场由于空间变化幅度大,分布存在大梯度和强间断,因此通常的平流输送数值计算方案难以给出较为准确的解。例如,直接采用二阶或更高阶精度的平流计算方案时,会带来虚假的振荡和负值,并且存在着难以接受的频散误差,这将破坏标量场固有的空间分布特点和守恒性。随着数值模式分辨率的提高尤其是在发展千米尺度的数值预报模式中,水物质的不连续、强梯度的现象更加突出,对平流计算精度的要求也越来越高。因此,高阶精度保形正定的平流计算方案对于提高数值模式的模拟预报精度具有重要意义。对于气候数值模式而言,计算水汽等标量场不仅要求高阶精度保形正定,守恒性也是考虑的重要内容。所谓标量场的保形平流计算方案就是在离散计算时尽可能地保持这些标量的空间分布特点和输送特性,使离散解保持与连续性方程解的形状相关的某种属性,这类属性有很多称呼(如:正定、单调和无振荡),但原则上都等价于保形。

针对欧拉方法的平流计算,研究者发展了很多较高精度正定保形方法,比如高阶精度的 Godunov 方法。它是由原来一阶精度 Godunov 差分格式改造而成的。其中,以 Van Leer(1979)设计的二阶精度(MUSCL)方案以及 Collella 等(1984)设计的三阶精度(PPM, the Piecewise Parabolic Method)方案为代表。其中,PPM 为了强制单调而采用的比较

复杂的单元界面值的调整。中国科学家发展的欧拉格式正定保形平流方案在中尺度数值模式中得到了有效应用。宇如聪等(1994)针对暴雨模式的水汽平流处理,提出了一个两步保形方案(TSPAS, a two-step shape-preserving advection scheme),该方案是结合 Lax-Wendroff 二阶精度方案和迎风格式的混合平流输送方案,有效地改进了暴雨中尺度数值模式中的水汽计算。谢邵成(1991)在 Smolarkiewicz(1983)方案的基础上,从半拉格朗日思想出发,设计出一种新的正定平流方案,并应用到当时中国国家气象中心细网格有限区域业务预报模式(FLM)当中,改善了出现负水汽的问题,使水汽平流计算更加合理。葛孝贞等(1997)将高精度正定水汽输送算法(Prather 方案和 Bott 4 阶方案)引入 MM4 中尺度模式中,研究结果表明对暴雨的模拟能力有所提高。

20 世纪 80 年代以来,半拉格朗日平流方法被广泛用于气象数值模式中(Robert, et al, 1985; Tanguay, et al, 1989, Ritchie, et al, 1995)。半拉格朗日处理平流的方法发展至今,显示出了与欧拉方法相当的精度,且具有较高的计算效率和较小的频散(Staniforth, et al, 1991; Pellerin, et al, 1995),同时,半拉格朗日方法也能够较好地抑制大梯度处的误差。但是,相对于欧拉格式而言,半拉格朗日平流格式普遍存在的问题是,由于内插造成物理量,如总质量、总能量等缺乏守恒性,给长时间数值积分带来误差(陈嘉滨等, 2004),此外,在大梯度和间断附近的标量场的计算中仍然存在计算精度和保形问题。Bermejo 等(1992)设计出一个有效、简单的算法使得传统的半拉格朗日转化为准单调半拉格朗日方案(QMSL),消除虚假的极大和极小值。该方案

基于如下考虑:在足够平滑的区域,方案采用高阶插值近似;反之,在不太平滑的区域,采用高阶方案会出现上冲或下冲的问题,为了更好地考虑真值的正定单调属性,加大了方案中线性插值的权重,但这样实现的单调是以降低计算精度为代价,同时也很难保持守恒性。随后,有一些研究来继续发展单调半拉格朗日方案以及守恒的单调半拉格朗日方案(Priestley, 1993, Bermejo, et al, 2002),如何在半拉格朗日模式中发展高阶精度的标量平流计算方案也是提高半拉格朗日数值模式精度的重要课题,一直备受研究者的关注。

中国气象局新一代中尺度数值预报模式 GRAPES_Meso 采用的半隐式半拉格朗日方案可同时兼顾计算精度、计算稳定性和计算效率(薛纪善等, 2008)。水物质的平流计算采用准单调半拉格朗日平流输送方案(Bermejo, et al, 1992)。该模式具有较完整的物理过程,能够很好地模拟预报中国汛期雨带的变动和主要降水事件,但是存在总体预报降雨强度偏弱、强降雨中心漏报较多的问题。对于降水数值预报而言,如何提高模式中像水物质这样具有不连续分布和大梯度特点的大气物理参量的平流计算精度,是影响降水预报效果的重要因素。如前所述,GRAPES 模式采用半拉格朗日方案计算水物质平流,在水汽梯度较大的地方有可能由于平流计算精度的问题而影响降水预报的效果,因此,研究高阶精度的标量平流计算方案不仅对进一步发展半拉格朗日数值模式有普遍意义,而且也是改进 GRAPES 降水预报效果的重要途径之一。另一方面,梅雨强降水是中国汛期天气的主要特点,大气下层水汽水平梯度大是梅雨锋的主要特点,因此对中国夏季降水的数值预报而言,研究高精度的水物质平流计算方案尤显重要。本研究结合计算流体力学的最新研究成果,在 GRAPES 模式中实现适合于半拉格朗日模式的高精度正定保形的物质平流方案(Xiao, et al, 2004)。

本文通过一维、二维理想试验,以及将物质平流方案应用到 GRAPES 模式中的球面理想试验,确认物质平流方案的优点及在 GRAPES 模式中的可行

性,简单介绍物质平流方案及其在 GRAPES 模式中的实现方法,给出理想试验结果及分析。

2 物质平流方案

2.1 物质平流方案简介

物质平流方案(Xiao, et al, 2004)是一个高精度、正定保形的方案,非常简单、实用,易于编程,并且计算效率高,在流体力学中有广泛的用途。在很多方面可以与 PPM 相媲美,如计算精度和保形。物质平流方案是 PPM 的变形,用分段有理函数代替了 PPM 中分段抛物线函数。利用有理函数保凸的性质,可以得到较少振荡的数值解,同时避免了 PPM 中强制单调而采用的单元界面值的调整。此外,物质平流方案采用的是通量方程,这样可以保持平流的守恒性。

考虑一维无辐散守恒平流方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial fu}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

其中, t 为时间, x 为空间坐标, u 为特征速度, f 为所要输送的物理量。事实上,方程(1)就是关于 $f(x, t)$ 的守恒定律的数学表达式,是欧拉通量形式的守恒方程。若 f 为空气密度,方程(1)即为连续方程,描述的就是质量守恒定律。

首先,将式(1)两边在单元格 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 内积分,移项得到

$$\Delta x \frac{\partial \bar{f}_i}{\partial t} = -[(uf)_{i+1/2} - (uf)_{i-1/2}] \quad (2)$$

其中

$$\Delta x \bar{f}_i = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x, t) dx \quad (3)$$

$$(uf)_{i+1/2} - (uf)_{i-1/2} = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial(fu)}{\partial x} dx \quad (4)$$

$\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$, $\bar{f}_i$ 表示第 i 单元格输送量的积分单元平均值, $(uf)_{i+1/2}$ 、 $(uf)_{i-1/2}$ 表示通过第 i 个单元格 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 左右边界的通量。

对式(2)进行时间积分 $[t^n, t^{n+1}]$, 可以得到

$$\bar{f}_i^{n+1} - \bar{f}_i^n = -\frac{1}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} (uf)_{i+1/2} dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} (uf)_{i-1/2} dt \right) \quad (5)$$

$\bar{f}_i^n$ 表示第 n 时刻的单元格 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 的积分平

均值, 由 $\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x, t^n) dx = \Delta x \bar{f}_i^n$ 确定, 即 $\bar{f}_i^n = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} F_i(x) dx$, 其中, $F_i(x)$ 表示 t^n 时刻在单元格 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 的函数分布形式。

在 PPM 方案中, $F_i(x)$ 表示为

$$F_i(x) \equiv P_i(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1/2}) + c_i(x - x_{i-1/2})^2 \quad (6)$$

$$x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$$

抛物线函数 $P_i(x)$ 在大梯度附近会产生上冲或下冲现象, 为了消除这种数值解的振荡, PPM 方案对相邻单元格间的界面值进行了调整。

物质平流方案则是采用如下有理函数代替式 (6)。

$$F_i(x) \equiv R_i(x) = \frac{[a_i + 2b_i(x - x_{i-1/2}) + \beta_i b_i(x - x_{i-1/2})^2] \cdot [1 + \beta_i(x - x_{i-1/2})]^{-2}}{x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]} \quad (7)$$

$F_i(x)$ 可以由已知的 $\bar{f}_i^n$ 和插值得出的 $f_{i-1/2}$ 、 $f_{i+1/2}$ 构造得出 (方案的具体实现见附录 I)。

2.2 物质平流方案在半拉格朗日平流计算中的应用

物质平流方案不仅具有高精度正定保形的优势, 而且方案简单易行。与欧拉平流方案相比, 通常的半拉格朗日平流方案具有计算效率高、频散小的特点, 但不能保持被输送量的守恒 (Pellerin, 1995; Rančić, et al, 1992), 且在物理量分布不连续区域, 平流计算精度不高。如果将物质平流方案应用在半拉格朗日平流计算中, 既可以保留半拉格朗日时间积分方案中积分时间步长大、计算效率高的特点, 又能发挥物质平流方案的优势和保持守恒性。

为了达到此目的, 出现了一种新的半拉格朗日方法——“积分单元格”半拉格朗日方法 (Cell-integrated schemes, Rančić, et al, 1992), 也称映射单元格方法。其基本思想是把单元格的积分平均值作为平流的物理量, “到达单元格”内第 $n+1$ 时刻的物理量积分值对应的是上游点的“出发单元格”内第 n 时刻的物理量积分值。整体单元格的映射保证了输送量的守恒 (推导参见附录 II)。出发单元格的物理量可以采用某种假设的空间分布函数在对应的上游单元格进行积分计算得到。

Rančić 等 (1992) 曾将 PPM 方案应用到二维笛卡尔坐标系下的半拉格朗日平流计算中。Lin 等

(1996) 提出的通量形式的半拉格朗日方法也属于类似方法。然而, “积分单元格”半拉格朗日方法虽然避免了通常半拉格朗日方法的守恒性问题, 但也有不足之处, 最主要的缺点是它的复杂性、计算代价也随着问题从一维到二维、到三维的增加而增加。

基于上述讨论, 本研究在 GRAPES 模式中发展一个以物质平流方案为基础的单元格积分的半拉格朗日平流方案。另外, “积分单元格”半拉格朗日方案扩展到多维时面临算法的困难, 本研究采用修正的分维算法 (Clappier, 1998) 成功地实现了基于物质平流方案的半拉格朗日平流方案。

3 理想试验

将物质平流方案应用到 GRAPES 模式之前, 有必要对其精度、耗散性、频散性等特点作进一步的验证, 同时与 GRAPES 模式中目前的平流方案进行对比。为此, 设计了 3 组理想试验, 包括一维、二维和三维的球面试验。由于二维试验得到的结论与一维类似, 这里只给出一维和三维的结果。

为了定量检验数值试验的结果, 定义总误差 E_{TOT} , 即方差为

$$E_{TOT} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\bar{f}_i^n - f_i^{\text{exact}})^2 \quad (8)$$

其中, N 是格点数, $\bar{f}_i^n$ 是第 n 时刻第 i 单元格平均值, f_i^{exact} 是第 n 时刻第 i 单元格平均值的真解。

总误差又可以分为耗散误差和频散误差两部分

$$E_{TOT} = E_{DISS} + E_{DISP} \quad (9)$$

其中, $E_{DISS} = [\sigma(\bar{f}^n) - \sigma(f^{\text{exact}})]^2 + (\bar{f}^n - \bar{f}^{\text{exact}})^2$, $E_{DISP} = 2(1-r)\sigma(\bar{f}^n)\sigma(f^{\text{exact}})$, $\bar{f}^n$ 表示平均值, $\sigma(\bar{f}^n)$ 表示标准差, r 表示 $\bar{f}^n$ 与 f^{exact} 的相关系数。

3.1 一维试验

为了考察物质平流方案对强梯度分布的物理量的平流计算能力, 一维试验中考虑了平流问题方程 (1), 并选择三角波和方波两种初始分布状态, 与 PPM 和采用三次插值的半拉格朗日方案进行对比分析。PPM 方案如式 (6) 所示。采用三次插值的半拉格朗日方案表达式

$$Q(x) = \sum_{i=1}^4 C_i(x) \varphi_i \quad (10)$$

其中, $Q(x_j) = \varphi_i$ 为 4 个格点中任意一个值,

$$C_i(x) = \frac{\prod_{k \neq i}^4 (x - x_k)}{\prod_{k \neq i}^4 (x_i - x_k)}。$$

在试验中,取均匀格距 $\Delta x = 1.0$,区域格点数为 70,3 个平流方案积分时间保持一致。为了检验该方案的数值频散性质,计算在不同柯朗数条件下的物理量输送以及总误差、频散误差、耗散误差。当柯朗数为 0.02 时,时间步长 $dt = 0.02$,积分 10400 步;当柯朗数为 1.04 时,时间步长 $dt = 1.04$,积分 200 步。

3.1.1 三角波试验

初始条件为

$$f(x,0) = \begin{cases} 1.0 - \frac{|x-20.0|}{15.0} & 5.0 \leq x \leq 35.0 \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (11)$$

$$u(x,0) = 1.0 \quad (12)$$

经过相同的时间积分,3 个方案在不同柯朗条件下解的分布(图 1)表明,物质平流方案对被输送量的分布形状整体效果保持的最好,既不会出现 3 次插值的半拉格朗日方案对振幅的衰减较大的情况,同时又比 PPM 在迎风方向产生更小的形变。在对应的误差图(图 2)中,可以发现物质平流方案的误差最小,表明物质平流方案效果较好。

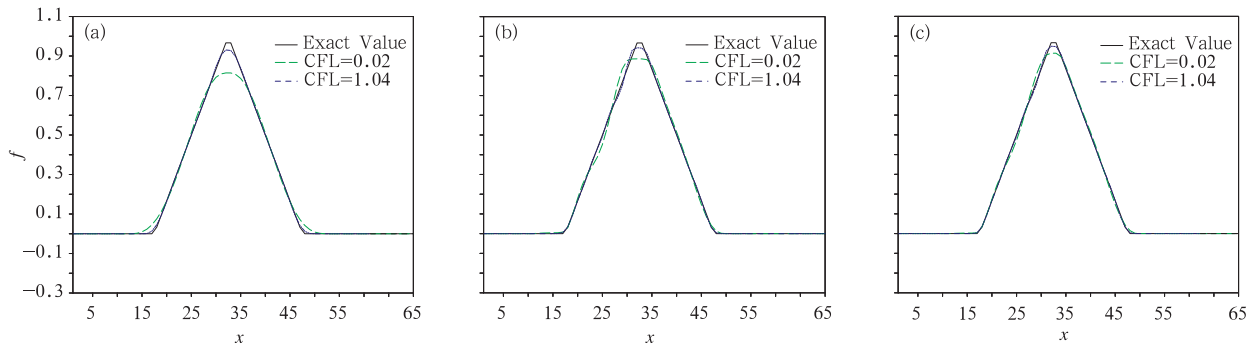


图 1 三角波采用 3 种不同平流方案的数值平流试验结果

(a. 半拉格朗日方案, b. PPM 方案, c. 物质平流方案。实线表示真解,长虚线和短虚线分别表示柯朗数为 0.02 和 1.04 的结果)

Fig.1 Triangular waves as are transported by using the three different advection schemes; (a) the SL scheme, (b) the PPM scheme and (c) the PRM scheme with the different Courant number CFL being 0.02 (long dashed line) and 1.04 (short dashed line) used. In each panel, real line represents the exact value

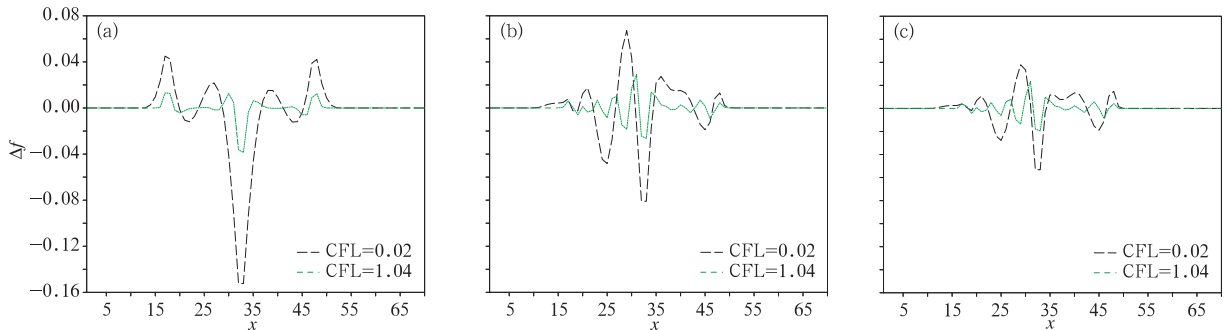


图 2 同图 1,但为误差分布 $\Delta f = f_i^n - f_i^{\text{exact}}$

Fig.2 As in Fig.1 but for the error of $\Delta f = f_i^n - f_i^{\text{exact}}$

为进一步说明问题,分析 3 种平流方案的总误差、频散误差和耗散误差随时间的变化(图 3)可见,PPM 和物质平流方案的耗散误差远小于 3 次插值的半拉格朗日方案(图 3b 和 3e),而且频散误差也

相对很小。PPM 和物质平流方案比较来看,无论在柯朗数为 0.02 还是为 1.04 情况下,物质平流方案的总误差、耗散误差、频散误差都相对要小,进一步说明了物质平流方案具有更大的优势。

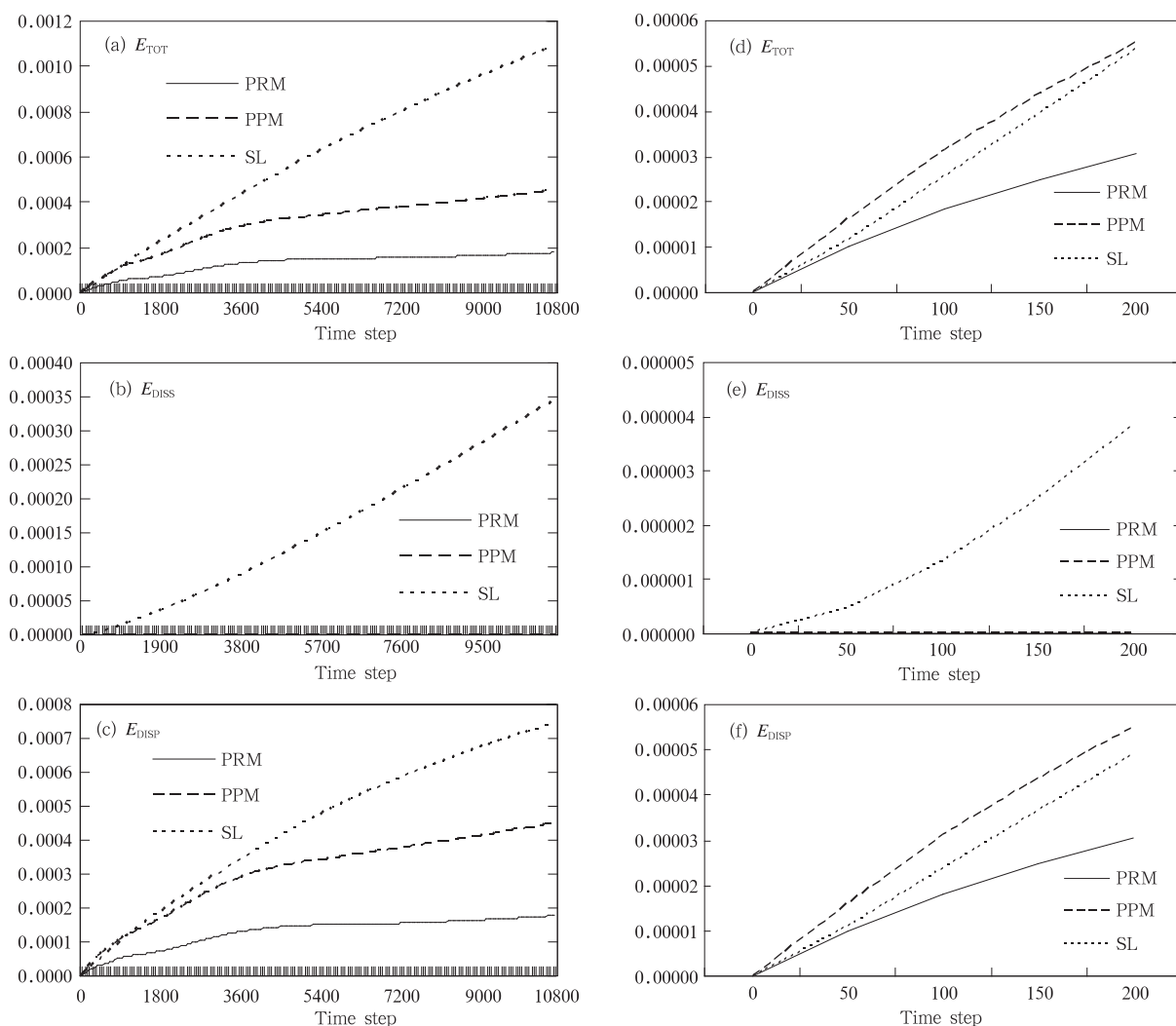


图3 三角波采用3种不同平流方案的数值平流试验的总误差 E_{TOT} (a,d)、耗散误差 E_{DISS} (b,e)、频散误差 E_{DISP} (c,f) 分析

(a,b,c, 柯朗数为 0.02, d,e,f, 柯朗数为 1.04. 实线、短虚线、点线分别对应的是物质平流方案、PPM 方案、半拉格朗日方案的 3 类误差)

Fig.3 Errors E_{TOT} (a,d), E_{DISS} (b,e) and E_{DISP} (c,f) for the triangular wave as are transported using the SL scheme (dotted line), the PPM scheme (dashed line) and the PRM scheme (real line) with the different Courant number of 0.02 (a-c) and 1.04 (d-f) taken

3.1.2 方波试验

通过计算方波的平流,进一步检验方案对间断的捕捉能力。

方波的初始分布取

$$f(x,0) = \begin{cases} 1.0 & 10 \leq x \leq 40 \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (13)$$

图4所示物质平流方案可以产生与PPM方案几乎相同的数值解。表1给出了试验中3种平流方案的总质量和总质量平方的守恒性、最大和最小数

值解以及总误差。物质平流的最小值拥有非常小的量级,可以看作正定。PPM方案在数值计算中有强制单调的处理,该处理会将最高点“削平”,所以在这样的试验中,PPM给出一个相对较好的结果。但物质平流方案的表现也不逊色,对方波的平流能力与PPM接近。

通过一维方波平流试验,从表1中的RFM和RSM可以看出方波的总质量与总质量的平方在平流输送前后保持较好。同时,物质平流方案的计算

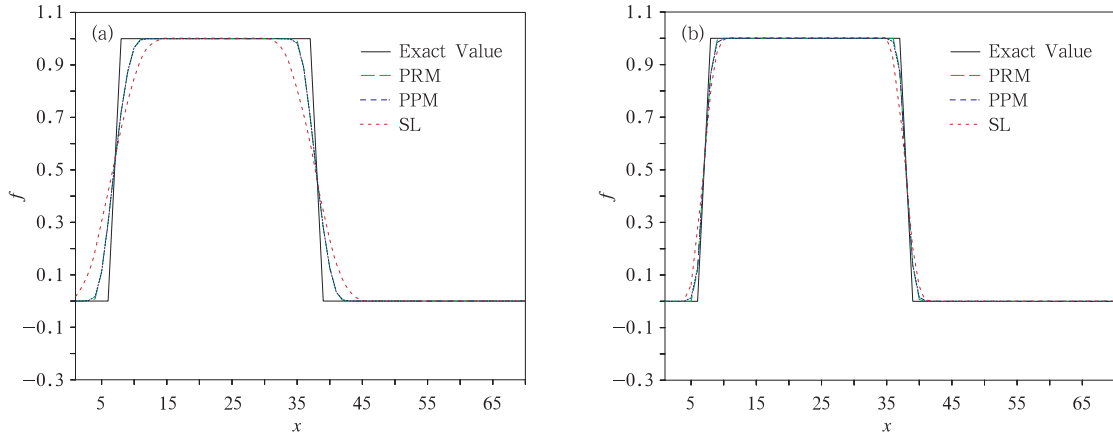


图4 方波波采用3种不同平流方案的数值平流试验结果(a. 柯朗数为0.02, b. 柯朗数为1.04。

实线表示真解,长虚线、短虚线和点线分别表示物质平流方案、PPM方案、半拉格朗日方案)

Fig. 4 Square waves as are transported by using the three different advection schemes: the SL scheme (dotted line), the PPM scheme (short dashed line) and the CFL scheme (long dashed line) with the different Courant number of 0.02 (a) and 1.04 (b) taken. In each panel, real line represents the exact value

表1 3种方案计算方波输送的计算误差

Table 1 The computational errors in the square waves transported by using the SL scheme, the PPM, and the PRM

柯朗数	方案	RFM	RSM	最大	最小	E_{TOT}
0.02	半拉格朗日	1.00000011	1.10233768	1.00000000	0.00000000	$1.45092883 \times 10^{-2}$
	PPM	1.00000000	1.04644276	0.99999999	$3.05144180 \times 10^{-15}$	$5.55644868 \times 10^{-3}$
	物质平流	0.99999999	1.04549005	1.00000000	$-2.33999101 \times 10^{-36}$	$5.69476097 \times 10^{-3}$
1.04	半拉格朗日	0.99999998	1.03162261	1.00000000	0.00000000	$3.42518619 \times 10^{-2}$
	PPM	1.00000000	1.01733013	1.00000000	$1.64644127 \times 10^{-39}$	$1.01438214 \times 10^{-3}$
	物质平流	1.00000000	1.01517587	1.00000000	$-1.46936797 \times 10^{-37}$	$9.44248470 \times 10^{-4}$

RFM: $\int \bar{f}(t) / \bar{f}(0)$, RSM: $\int \bar{f}^2(t) / \bar{f}^2(0)$ 。

误差(E_{TOT})较小,物理量在输送的过程中衰减和频散小(图4),在强梯度处计算精度高。与拉格朗日3次插值的半拉格朗日方案相比,PPM方案具有与物质平流类似的优点,并且物质平流方案采用有理函数构造插值函数,在程序实现与计算效率方面优于PPM方案。

3.2 球面坐标系下的三维理想试验

3.2.1 分维算法简介

分维算法由于易于实现,被广泛用来计算多维平流。任何一维平流算法都可以通过分维算法扩展到三维。下面以二维为例,说明该算法的原理。

对于二维无辐散守恒平流方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial uf}{\partial x} + \frac{\partial vf}{\partial y} = 0 \quad (14)$$

分维算法为

$$\begin{aligned} f'_i &= f_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta(u \bar{f}^x) \\ f_i^{n+1} &= f'_i - \frac{\Delta t}{\Delta y} \Delta(v \bar{f}'^y) \end{aligned} \quad (15)$$

其中, $\bar{f}$ 为单元格的平均值, i 为第 i 个单元格, Δt 为时间步长, Δx 和 Δy 分别表示 x 、 y 方向的格距, u 和 v 分别表示 x 、 y 方向的速度, n 表示第 n 时刻。

这种方法简单易行,但是,当流场在 x 方向或 y 方向存在辐合辐散时,就会产生虚假的梯度。为了解决这一问题,Clappier(1998)提出了一种加入修正项的分维算法。具体算法为

$$\begin{aligned} f'_i &= f_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta(u \bar{f}^x) \\ f_i^c &= f'_i + f_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta u \\ f_i^{n+1} &= f_i^c - \frac{\Delta t}{\Delta y} \Delta(v \bar{f}^{cy}) \end{aligned} \quad (16)$$

每一步先求解一维质量守恒方程,然后对得到的值 f_i' 进行散度修正,得到一个中间值 f_i'' ,再用中间值算下一维的通量。同样,扩展到三维时可采用类似的办法。

在二维及三维情况下,物质平流方案的效果与 PPM 相当,这里不作重复叙述。目前 GRAPES 模式中采用的是 QMSL 水物质平流方案,下面比较物质平流方案与该方案的优缺点。

连续方程的通量形式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0 \quad (17)$$

假设空气微团中无水汽源或汇,水汽方程记为

$$\frac{\partial \rho q}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho q V) = 0 \quad (18)$$

其中,水汽密度 $\rho_v = \rho q$, q 为比湿。

把式(17)乘以 q 并与式(18)相减,得到用比湿 q 表示的水汽方程

$$\frac{\partial q}{\partial t} + V \cdot \nabla q = 0 \quad (19)$$

将方程(19)两端同时加上散度项 $q \nabla \cdot V$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (qV) = q \nabla \cdot V \quad (20)$$

这样,方程(20)与方程(17)相比较,左边为通量形式,右边多了散度项,即散度修正项。

在高度地形追随、球面坐标系下,方程(20)可写成

$$\left(\frac{\partial q}{\partial t} \right)_\xi + \frac{\partial}{\partial \lambda} (q\bar{u})_\xi + \frac{\partial}{\partial \mu} (q\bar{v})_\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} (q\bar{w}) = q \cdot \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial \lambda} \right)_\xi + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial \mu} \right)_\xi + \frac{\partial \bar{w}}{\partial \xi} \right]_\xi \quad (21)$$

其中, $\bar{u} = \frac{U}{a(1-\mu^2)}$, $\bar{v} = \frac{V}{a}$, $\mu = \sin \phi$, $U = u \cos \phi$, $V = v \cos \phi$, u, v 分别表示纬向和经向风速, $\bar{w}$ 表示高度地形追随坐标下的垂直速度, λ, ϕ 分别为经度和纬度。 Q 表示水汽比湿,或液态水等其他水物质的比湿。

将上述方程分维重写成(Peng, et al, 2005)

$$\left(\frac{\partial q}{\partial t} \right)_\xi + \frac{\partial}{\partial \lambda} (q\bar{u})_\xi = q \cdot \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial \lambda} \right)_\xi \quad (22)$$

$$\left(\frac{\partial q}{\partial t} \right)_\xi + \frac{\partial}{\partial \mu} (q\bar{v})_\xi = q \cdot \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial \mu} \right)_\xi \quad (23)$$

$$\left(\frac{\partial q}{\partial t} \right)_\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} (q\bar{w})_\xi = q \cdot \frac{\partial \bar{w}}{\partial \xi} \quad (24)$$

具体计算时,每一步先用一维的物质平流方案计算方程左边的通量形式,方程右边的辐散项可用差分方法计算。

3.2.2 球面三维理想试验

试验设计:试验选用的是 GRAPES_Meso2.5, 固定边界条件。模式水平分辨率取 $0.3^\circ \times 0.3^\circ$, 垂直方向 31 层,模式层顶为 35000.0 m, 时间步长 $dt = 100$ s。模式范围为 $18.5^\circ - 41.3^\circ \text{N}$, $98.5^\circ - 126.4^\circ \text{E}$, 物理过程方案关闭。

初始水汽场取为直方体分布(图 5)为

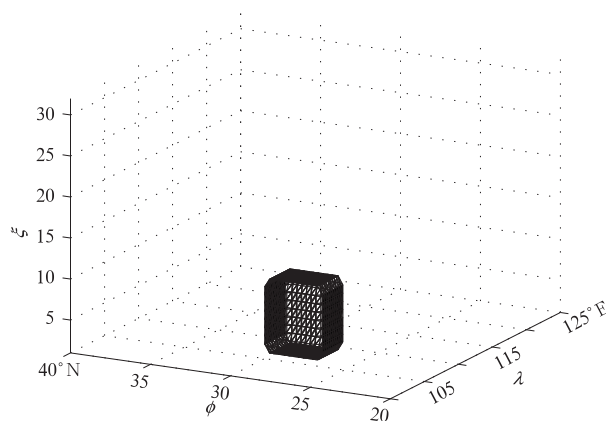


图 5 初始时刻 $t=0$ 水汽的分布

Fig. 5 An initial field of water vapor

$$q(\lambda, \phi, \xi, 0) = \begin{cases} 0.01 & \frac{102.7\pi}{180.0} \leq \lambda \leq \frac{105.7\pi}{180.0} \\ \frac{25.7\pi}{180.0} \leq \phi \leq \frac{28.7\pi}{180.0} \\ 4dk \leq \xi \leq 11dk \\ 0.00 & \text{其他} \end{cases} \quad (25)$$

令 $U_0 = 2\pi a / (12 \text{ d})$ (约 40 m/s), 其中, a 表示地球半径 6371000.0 m。

本文设计了以下 6 个试验(表 2), 分别在相同初始水汽分布、但不同流场的情况下, 比较分析两种

表 2 试验设计

Table 2 Experiment design

试验	U	V	w
试验 1	$U_0 \cos \phi$	0	0
试验 2	0	$U_0 \cos \phi$	0
试验 3	0	0	0.02
试验 4	$U_0 \cos \phi$	$U_0 \cos \phi$	0
试验 5	$U_0 \cos \phi$	0	0.02
试验 6	$U_0 \cos \phi$	$U_0 \cos \phi$	0.02

物质平流方案对模式积分效果的影响。

试验 1 只考虑了纬向气流。模式积分 251 步之后,如果平流过程没有耗散和频散误差,那么水汽柱应该是图 6a 所描述的分布。当水物质平流方案是 QMSL 时,从最后的积分结果(图 6b)可以看出,水汽柱已经变形、增大,8 条棱角逐渐圆滑起来。这是由于 QMSL 平流方案在计算中存在耗散和频散误差造成的。当水物质平流方案为物质平流时,在最后的积分结果(图 6c)中,水汽柱体积也有增加,棱角也存在着圆滑,但是这种变化的程度比图 6b 小。

试验 2 只考虑经向气流(图略)。两种平流计算方案的模式积分结果类似于试验 1。物质平流在模式水物质平流计算中,计算误差比 QMSL 小。

试验 3 只考虑垂直方向上的气流。从图 7a、7b 看出,在积分时间到第 251 步时,QMSL 的平流计算结果将水汽柱在竖直方向比物质平流方案变长的程度更大。另外,在水汽分布梯度大的侧棱处,采用物质平流方案的模式积分结果也比 QMSL 的结果

要好。

接下来的试验 4(图略)、试验 5(图略)、试验 6(图 8),得出相同的分析结论。在模式中,采用物质平流方案比采用 QMSL 平流方案在对不连续水汽分布的平流计算中具有更好的保形特点。

在相同分辨率、时间步长、初始条件的情况下。经过相同的时间积分,模式采用了不同的平流方案时,积分的结果也不尽相同。从对结果的误差分析图(图 9)中,可以更好、更明显的定量比较两种水物质平流方案在试验中的效果。在 6 个试验中,物质平流的误差比 QMSL 小,物质平流方案在模式中的平流计算比 QMSL 方案更好地描述水物质的空间分布特点和输送特性。

水物质平流是模式动力部分模拟的重要过程之一,平流计算方案的优劣,也对模式积分结果产生非常重要的影响。通过以上的试验,与 GRAPES 模式中原有水物质平流方案相比,物质平流方案对改善水汽平流方面具有一定的优势。

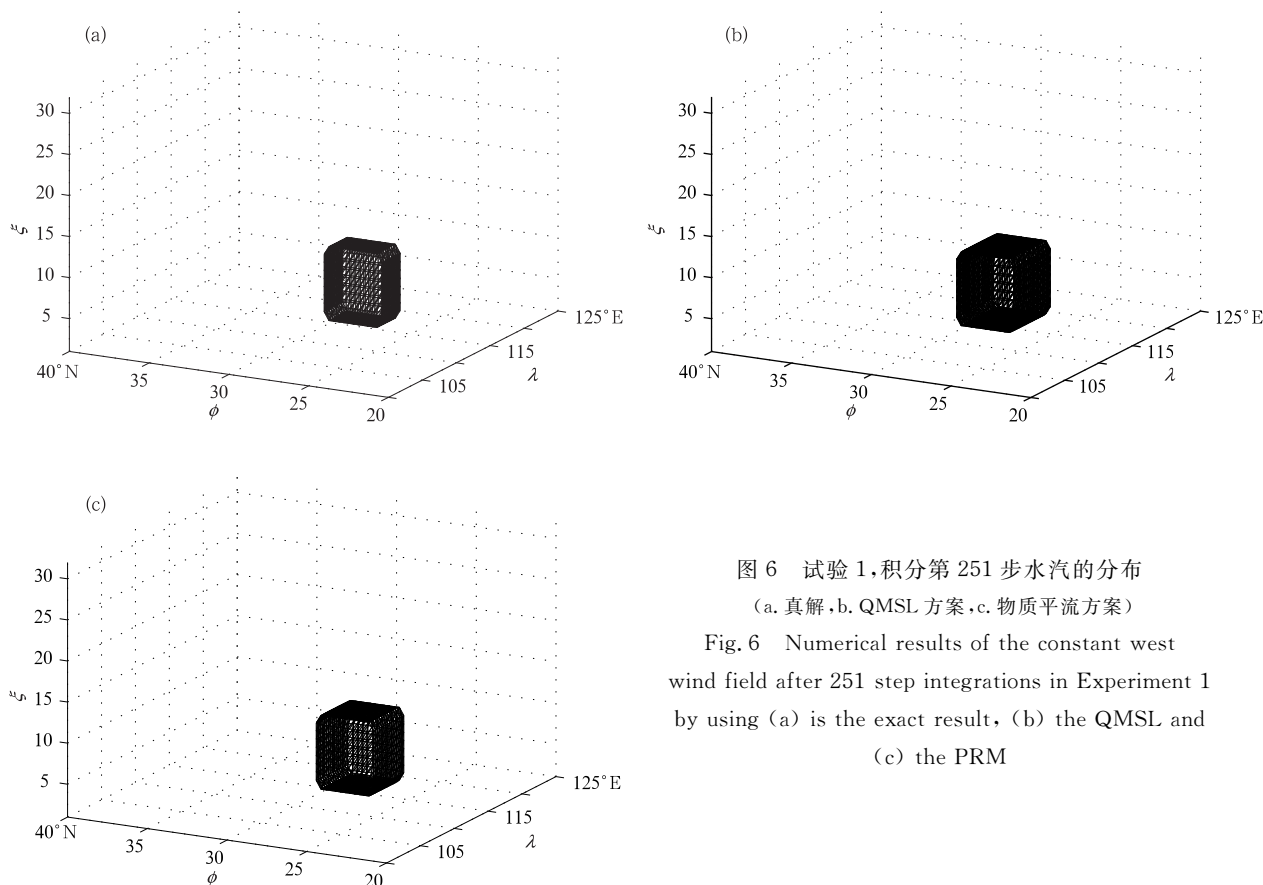


图 6 试验 1,积分第 251 步水汽的分布

(a. 真解, b. QMSL 方案, c. 物质平流方案)

Fig. 6 Numerical results of the constant west wind field after 251 step integrations in Experiment 1 by using (a) is the exact result, (b) the QMSL and (c) the PRM

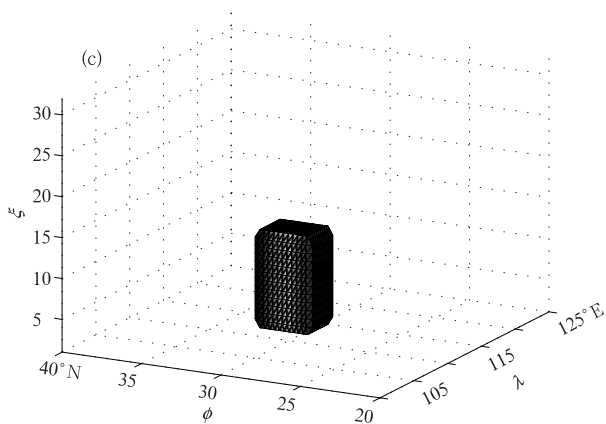
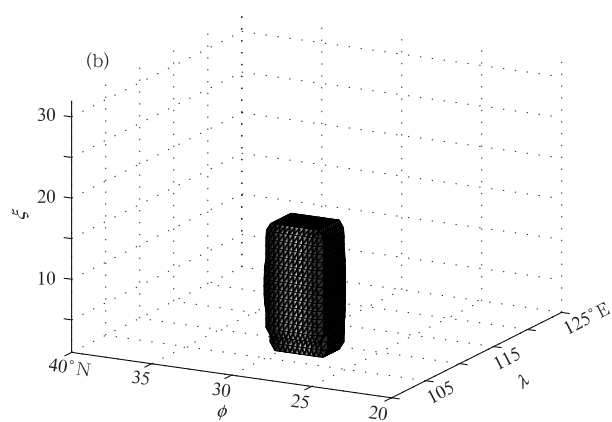
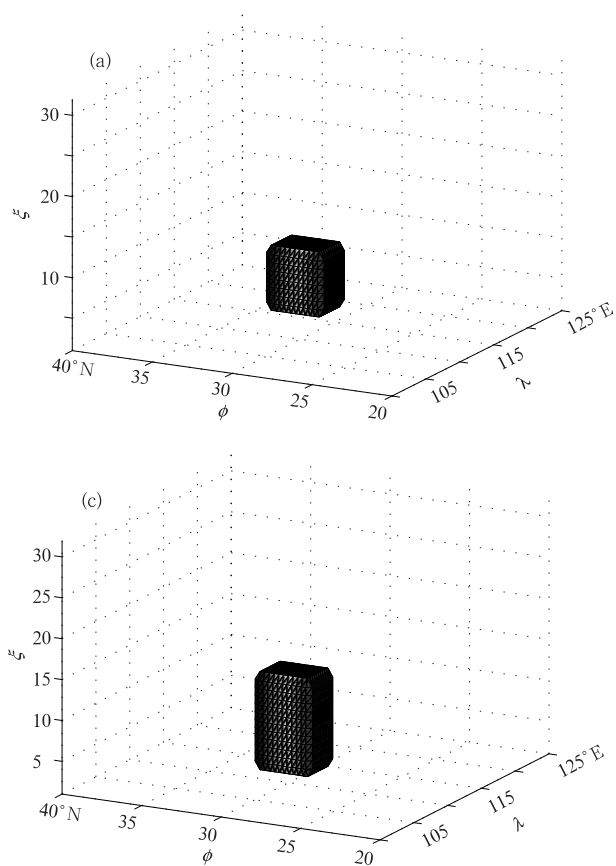


图7 试验3,积分第251步水汽的分布

(a. 真解, b. QMSL 方案, c. 物质平流方案)

Fig. 7 As in Fig. 6 but for Experiment 3

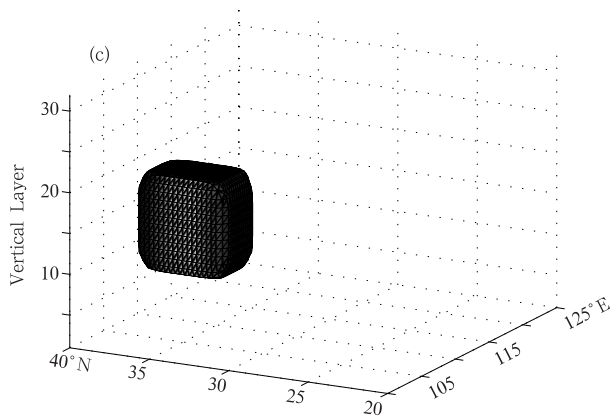
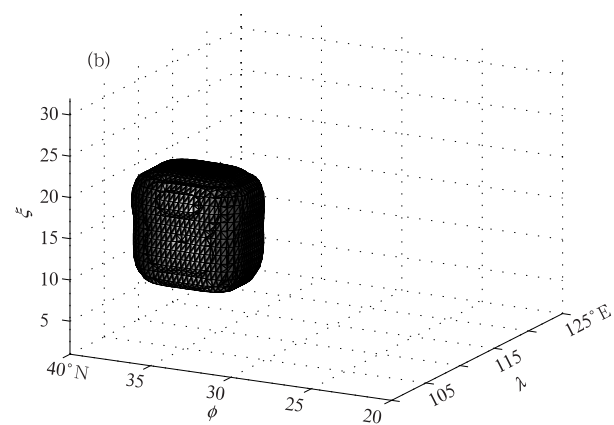
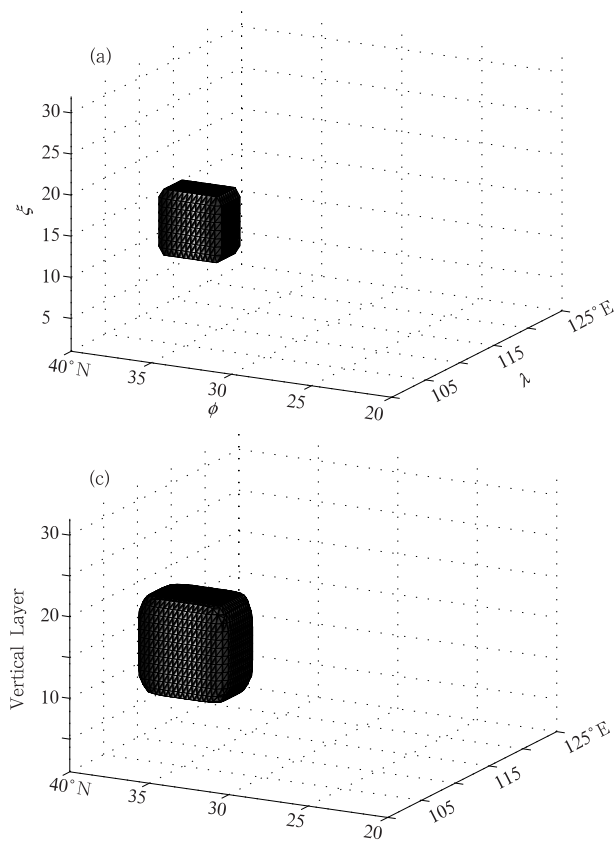


图8 试验6,积分第251步水汽的分布

(a. 真解, b. QMSL 方案, c. 物质平流方案)

Fig. 8 As in Fig. 6 but for Experiment 6

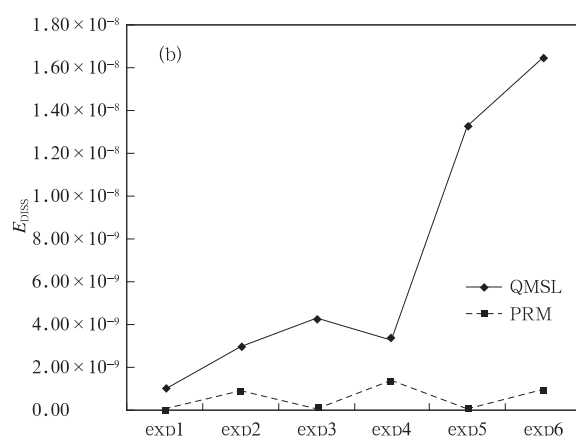
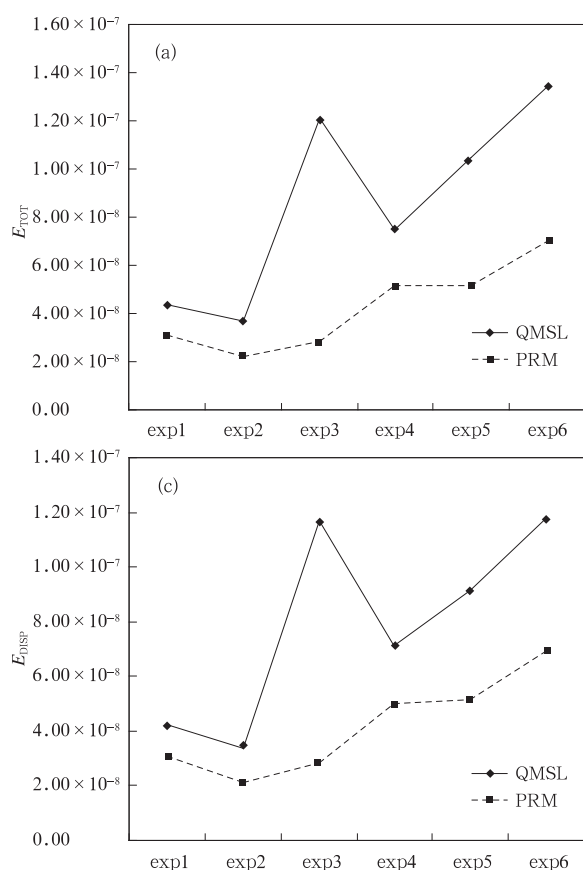


图9 试验1、试验2、试验3、试验4、
试验5、试验6积分251步时的误差
(a. 总误差, b. 耗散误差, c. 频散误差)

Fig.9 Numerical errors: (a) the total error, (b) the dissipation error and (c) the dispersion error for these 6 different experiments output after 251 step integrations

4 结 论

通过一维和多维理想试验,表明物质平流方案对于空间变化幅度大的物理量具有较高的平流能力。与三次拉格朗日插值相比,物质平流方案的耗散性更小。与 PPM 方案相比,两者有不少类似的地方,平流效果也几乎相当,但物质平流方案中采用的有理函数具有保凸的特性,而且它不需要界面值的调整,在实现上比 PPM 相对简单。

在 GRAPES 模式中的球面理想试验中,物质平流与 QMSL 平流方案结果进行比较分析,得出主要结论:

(1) 验证了物质平流方案接入模式的正确性、在球面三维坐标下的平流能力;

(2) 说明了与模式原来的 QMSL 方案相比,物质平流方案在平流过程中能更好地保持物理量的分布特点。

在设计的多种理想试验中,应用物质平流与其他一些平流方案(PPM、三次拉格朗日插值、QMSL)可以得到不同的平流结果。通过对比分析这些结

果,确认了物质平流方案的优点及其在 GRAPES 模式中的可行性。

致谢:感谢中国气象科学研究院灾害天气国家重点实验室的彭新东研究员和中国气象局数值预报中心的李兴良副研究员在物质平流方案的理解和理想试验的设计中的建议和帮助。感谢中国气象局数值预报中心的张红亮研究员和胡江林研究员在 GRAPES 动力框架问题上的帮助,以及伍湘君研究员在程序并行化实现上的帮助。

参考文献

- 陈嘉滨,季仲贞. 2004. 半隐式半拉格朗日平方守恒计算格式的构造. 大气科学,28(4):527-535
- 葛孝贞,郑爱军. 1997. 包含正定水汽输送算法改进的 MM4 中尺度模式与暴雨实例数值试验. 气象学报,55(5):573-587
- 谢邵成. 1991. 一种新的正定平流方案及其在水汽预报方程中的应用. 气象学报,49(1):11-20
- 薛纪善,陈德辉等. 2008. 数值预报系统 GRAPES 的科学设计与应用. 北京:科学出版社,342pp
- Bermejo R, Conde J. 2002. A conservative quasi-monotone semi-Lagrangian scheme. Mon Wea Rew, 130:423-430
- Bermejo R, Staniforth A. 1992. The conversion of semi-Lagrangian advection schemes to quasi-monotone schemes. Mon Wea Rew, 120: 2622-2632

- Clappier A. 1998. A correction method for use in multidimensional time-splitting advection algorithms: Application to two- and three-dimensional transport. *Mon Wea Rev*,126:232-242
- Colella P, Woodward P R. 1984. The Piecewise Parabolic Method (PPM) for gas-dynamical simulations. *J Comput Phys*,54: 174-201
- Lin S J, Rood R B. 1996. Multidimensional flux-form semi-Lagrangian transport schemes. *Mon Wea Rev*, 124:2046-2070
- Pellerin P, Laprise R, Zawadzki I. 1995. The performance of a semi-Lagrangian transport scheme for the advection-condensation problem. *Mon Wea Rev*,123: 3318-3330
- Peng X, Xiao F, Ohfuchi W, et al. 2005. Conservative semi-Lagrangian transport on a sphere and the impact on vapor advection in an atmospheric general circulation model. *Mon Wea Rev*,133: 504-520
- Priestley A. 1993. A quasi-conservative version of the semi-Lagrangian advection scheme. *Mon Wea Rew*, 121:621-629
- Rančić M. 1992. Semi-lagrangian piecewise bi-parabolic scheme for two-dimensional horizontal advection of a passive scalar. *Mon Wea Rev*,120:1394-1406
- Ritchie H. 1995. Implementation of the semi-Lagrangian method in a high-resolution version of the ECMWF forecast model. *Mon Wea Rev*,123:489-514
- Robert A, Yee T L, Ritchie H. 1985. A semi-Lagrangian and semi-implicit numerical integration scheme for multilevel atmospheric models. *Mon Wea Rev*,113:388-394
- Smolarkiewicz P K. 1983. A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion, *Mon Wea Rea*, 1983,111: 479-486
- Staniforth A, Côté J. 1991. Semi-Lagrangian integration scheme for atmospheric model—A review. *Mon Wea Rev*,119:2206-2223
- Tanguay M, Robert A, Laprise R. 1990. A semi-implicit semi-Lagrangian fully compressible regional forecast model. *Mon Wea Rev*,118:1970-1980
- Van Leer B. 1979. Toward the ultimate conservative difference scheme: a second-order scheme to Godunov's method. *J Comput Phys*,32:101-136
- Xiao F, Peng X D. 2004. A convexity preserving scheme for conservative advection transport. *J Comput Phys*,198:389-402
- Yu Rucong. 1994. A two-step shape-preserving advection scheme. *Adv Atmos Sci*,11: 479-490

附录 I :物质平流方案的实现步骤

对于单元格界面值 $f_{i-1/2}$ 和 $f_{i+1/2}$ 的计算,物质平流方案采用单元格积分平均值 $\bar{f}_i (i=0,1,\dots,i_{\max})$ 进行插值近似,选用 PPM 方案计算界面值的插值方法:

$$f_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\bar{f}_i + \bar{f}_{i+1}) - \frac{1}{6}(\bar{\delta}f_i - \bar{\delta}f_{i-1}) \quad (\text{A1})$$

其中, $\bar{\delta}f_i$ 表示在单元 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 中的平均斜率。对于非均匀网格时,表达式为

$$\bar{\delta}f_i = \begin{cases} \min(|\delta f_i|, \alpha_1 |\bar{f}_{i+1} - \bar{f}_i|, \alpha_2 |\bar{f}_i - \bar{f}_{i-1}|) \text{sgn}(\delta f_i) & \text{当 } (\bar{f}_{i+1} - \bar{f}_i)(\bar{f}_i - \bar{f}_{i-1}) > 0 \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (\text{A2})$$

$$\text{sgn}(\delta f_i) = \begin{cases} 1.0 & \delta f_i \geq 0.0 \\ -1.0 & \delta f_i \leq 0.0 \end{cases}, \quad \alpha_1 = \alpha_2 = 3.0$$

$$\delta f_i = (\bar{f}_{i+1} - \bar{f}_{i-1})/2$$

当 $\bar{f}_i^n$ 和 $f_{i-1/2}, f_{i+1/2}$ 都为已知时,根据以下的约束条件可以确定分段插值函数 $F_i(x)$ 。

$$\begin{cases} F_i(x_{i-1/2}) = f_{i-1/2} \end{cases} \quad (\text{A3})$$

$$\begin{cases} F_i(x_{i+1/2}) = f_{i+1/2} \end{cases} \quad (\text{A4})$$

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} F_i(x) dx = \bar{f}_i \end{cases} \quad (\text{A5})$$

由式(A3)–(A5)计算 $F_i(x)$ 的系数为

$$\begin{cases} a_i = f_{i-1/2} \end{cases} \quad (\text{A6})$$

$$\begin{cases} b_i = \beta_i f_i + \frac{1}{\Delta x_i}(\bar{f}_i - f_{i-1/2}) \end{cases} \quad (\text{A7})$$

$$\begin{cases} \beta_i = \Delta x_i^{-1} \left[\frac{f_{i-1/2} - \bar{f}_i}{\bar{f}_i - f_{i+1/2}} - 1 \right] \end{cases} \quad (\text{A8})$$

在 $(\bar{f}_i - f_{i+1/2})(f_{i-1/2} - \bar{f}_i) < 0$ 的情况下,当 $1 + \beta_i b_i (x - x_{i-1/2}) \approx 0$ 时,就是极值点的输送,产生奇异,需要调整 β_i 为

$$\tilde{\beta}_i = \Delta x_i^{-1} \left[\frac{|f_{i-1/2} - \bar{f}_i| + \epsilon}{|\bar{f}_i - f_{i+1/2}| + \epsilon} - 1 \right] \quad (\text{A9})$$

ϵ 是一个非常小的正值,避免分母为 0,因此,在所使用的计算机限制内 ϵ 取得越小越好(如 $\epsilon = 10^{-20}$)。

给出第 n 时间步的积分单元的平均值 $\bar{f}_i^n$,首先由式(A1)计算出所有网格单元界面值 $f_{i+1/2}$ 。然后根据 $\bar{f}_i^n, f_{i-1/2}^n$ 和 $f_{i+1/2}^n$ 构造出插值有理函数。每个单元 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 上的插值函数都可以表示为以 $x_{i-1/2}$ 或 $x_{i+1/2}$ 为基点的两个函数。

$$R_i^+(x) = \frac{a_i^+ + 2b_i^+(x - x_{i-1/2}) + \tilde{\beta}_i^+ b_i^+(x - x_{i-1/2})^2}{[1 + \tilde{\beta}_i^+(x - x_{i-1/2})]^2} \quad x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \quad (\text{A10})$$

或

$$R_i^-(x) = \frac{a_i^- + 2b_i^-(x - x_{i+1/2}) + \tilde{\beta}_i^- b_i^-(x - x_{i+1/2})^2}{[1 + \tilde{\beta}_i^-(x - x_{i+1/2})]^2} \quad x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \quad (\text{A11})$$

为了易于编程,根据迎风的方向选择 R^+ 或 R^- 。令 $\gamma_i^+ = 1 + \tilde{\beta}_i^+ \Delta x_i, R_i^+(x)$ 的系数可以立即得到

$$\begin{cases} a_i^+ = f_{i-1/2}^n \end{cases} \quad (\text{A12})$$

$$\begin{cases} b_i^+ = \frac{1}{\Delta x_i}(\gamma_i^+ \bar{f}_i^n - f_{i-1/2}^n) \end{cases} \quad (\text{A13})$$

$$\begin{cases} \tilde{\beta}_i^+ = \Delta x_i^{-1} \left(\frac{|f_{i-1/2}^n - \bar{f}_i^n| + \epsilon}{|\bar{f}_i^n - f_{i+1/2}^n| + \epsilon} - 1 \right) \end{cases} \quad (\text{A14})$$

同理, $R_i^-(x)$ 的系数 $\tilde{\beta}_i^-$ 、 b_i^- 、 a_i^- 仅仅需要在 $R_i^+(x)$ 表达式相应的位置上改变一下 $f_{i-1/2}^n$ 和 $f_{i+1/2}^n$ 顺序, $-\Delta x_i$ 代替 Δx_i 即可。确定了所有单元格的分段插值函数 $R_i(x)$ 以后, 计算下一个时刻的积分单元的平均值 $\bar{f}_i$ 。

$$\bar{f}_i^{n+1} = \bar{f}_i^n - (g_{i+1/2} - g_{i-1/2}) / \Delta x_i \quad (\text{A15})$$

其中, $g_{i-1/2}$ 和 $g_{i+1/2}$ 表示在从 t^n 到 t^{n+1} 的时间内分别经过界面 $x = x_{i-1/2}$ 和 $x = x_{i+1/2}$ 的通量。

$$g_{i+1/2} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left\{ \min(0, u_{i+1/2}) R_{i+1}^+[x_{i+1/2} - u_{i+1/2}(t - t^n)] - \max(0, u_{i+1/2}) R_i^-[x_{i+1/2} - u_{i+1/2}(t - t^n)] \right\} dt \quad (\text{A16})$$

由式(A10)或(A11)可以得到

$$g_{i+1/2} = \begin{cases} -\frac{a_{i+1}^+ \xi + b_{i+1}^+ \xi^2}{1 + \tilde{\beta}_{i+1}^+ \xi} & u_{i+1/2} < 0 \\ -\frac{a_{i+1}^- \xi + b_{i+1}^- \xi^2}{1 + \tilde{\beta}_{i+1}^- \xi} & u_{i+1/2} > 0 \end{cases} \quad (\text{A17})$$

其中, $\xi = \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(t)_{i+1/2} dt$ 。

附录 II : 有限体积半拉格朗日方法或“积分单元格”半拉格朗日方法

以连续方程为例。

(1) 从拉格朗日的观念出发, 对于有限体积内的质量的连续方程推导

考虑质量为 δM 的体积单元 δV , 对 δM 运用拉格朗日观点, 根据质量守恒定律有

$$\frac{d\delta M}{dt} = 0 \quad (\text{B1})$$

其中, $\delta M = \delta V \bar{\rho}$, $\bar{\rho} = \frac{1}{\delta V} \iiint_{\delta V} \rho dV$

所以

$$\frac{d\delta M}{dt} = \frac{d(\delta V \bar{\rho})}{dt} = 0 \quad (\text{B2})$$

那么, 有限体积的半拉格朗日方法或者说“积分单元格”的半拉格朗日方法, 类似常规半拉格朗日的思想, 被平流的标量场是单元格的平均值的物理量场。半拉格朗日的时间离散就是说到达单元格下一个时刻的物理量的积分平均值是它对应的上游点单元格的积分平均值。

于是

$$\delta V \frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{d\delta V}{dt} = 0 \quad (\text{B3})$$

其中, $D = \frac{1}{\delta V} \frac{d\delta V}{dt}$ 为体积膨胀率或速度散度 $\nabla \cdot v$ 。

所以, 连续方程为

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot v = 0 \quad (\text{B4})$$

(2) 因为 $\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + v \cdot \nabla \rho$, 那么可以得到欧拉观点下能量形式的连续方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0 \quad (\text{B5})$$

此方程表示单位体积内由密度场不定常性引起的质量变化应该与流出单位体积表面的流体质量相抵消,根据也是质量守恒定律。

(3) 在有限体积半拉格朗日平流方法或者说“积分单元格”的半拉格朗日方法中,上游单元格的物理量的值就可以采用有限体积的方法计算。

综上,可以得到

$$\bar{\rho}_{i,j}^{n+1} \Delta V_{i,j} = \delta V_{di,j}^n \bar{\rho}_{di,j}^n = \iiint_{\delta V_{di,j}^n} \rho^n dV \quad (\text{B6})$$

其中, $\delta V_{di,j}^n$ 是第 n 时刻第 (i,j) 点对应的上游点单元格的体积(图 B1)。

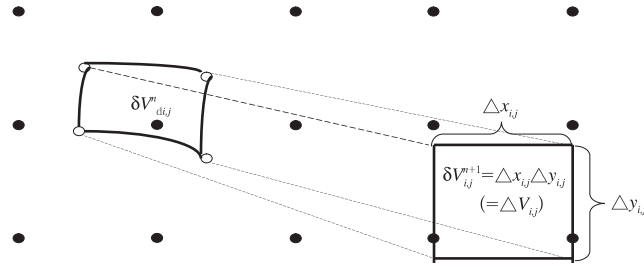


图 B1