

正定義數值方法的探討

郭鴻基¹

柳再明²

¹ 國立臺灣大學大氣科學系

² 中央氣象局氣象資訊中心

(中華民國八十二年十月十二日收稿；中華民國八十二年十二月二日定稿)

摘 要

本文研究是屬於數值天氣預報，或大氣理論模擬研究中，特殊數值方法之探討。文中著重 Smolarkiewicz 及 Hsu-Arakawa 正定義方法基本特性之討論。這些正定義數值方法可以保證平流計算之正(反)物理場，恆保持正(負)值。同時正定義計算方法可以有良好的質量保守，物理場向下游傳送，不受遠場影響之特性。

我們以高斯波、正弦波以及方形波等不同數學特質之一維平流，探討正定義法的精確度(收斂速度)、極大值之衰減、均方根誤差、穩定度。測試正弦波、高斯波結果顯示 Smolarkiewicz(1983) 低階法(SML)的相位有明顯往上游方向偏移，而且 SML 其校正步驟的反覆次數至多兩次即可。Smolarkiewicz 高階法(SMH)則產生有正確的相位，在兩次校正後的振幅強度衰減很小(繞一圈 320 時距後，維持原極大值之 93%)。Hsu 和 Arakawa (1990) 方法的相位也十分準確，振幅的衰減程度(約原極大值之 86.5%)比 SML 經二次校正(約原極值之 80%)為優。Smolarkiewicz 混合階法(SMM)和 SMH 的結果幾乎相同。因 SMM 計算項數較少，所以我們認為 SMM 是可用於氣象預報模式高精確度、高效率的正定義方法。在方形波的平流探討中，Hsu-Arakawa 及 Smolarkiewicz 法皆產生似合理之值，但此二方法都不具效率性。為比較起見，本文亦包括上游法，二階中差分法(FD2)及四階空間二階時間中差分法(FD4)之比較。

關鍵詞：平流方程、正定義方法、反擴散

一、前 言

在計算流力的許多領域中，適合平流方程的數值方法是十分的重要，對大氣科學而言亦不例外；國外探討平流計算之文章不勝枚舉，詳細可見 Rood (1987) 之文，在國內郭鴻基等(1990) 探討了二次及四次中差分法應用交錯網格之平流問題，以及一些正定義計算方法。平流計算法在於數值天氣預報或雲模式之水氣傳送，平衡動力模式之位渦傳送，以及化學模式之傳送都有極大應用性。在大氣科學中，污染物、水汽、位渦等之平流，因其物理量牽涉較強梯度及較小尺度，以目前一般大氣模式仍常用之計算方法處理上述平流，會使本應正值之物理場產生不合理之負值；這在梯度強的地方尤其明顯。因為這些不合理負值，會使模式產生不穩定，而人為程式

之設定負值為零，會使平流之正值場不保守，以及產生不合理之傳送。能有效率且正確處理這些場之平流，是本文研究之目的。本文所採之正定義法即在計算不產生負值之方法。

所謂正定義法(positive definite scheme)是指在數值積分過程中，保持平流場值恆為正的平流數值方法。一般正定義計算法，皆有良好之質量保守，物理場只向下游傳送，以及被傳送場只跟當地(local)性質有關之特性。這些特性對平流方程式計算而言，是十分的重要。近年來重要的正定義法首推 flux - corrected transport (FCT)法，是由 Boris and Book (1973), Boris (1976), Book et al. (1975)發展而來，而 Zalesak (1979)將 FCT 法擴充到多維。FCT 法對方形波的平流模擬結果近乎完美，但其缺點為，它會把一平滑之正弦波變成一方形波(Rood, 1987)，而且造成極值之衰減。另外 self - adjusting hybrid scheme (SAHS)由 Harten and Zwas (1972)、Harten (1978)根據 hybrid (混合法)發展而來，其平流通量的計算是由一階正定義通量及高階法的通量權重平均而求得，對震波及不連續形體的處理最有效率。Clark (1979)及 Clark and Hall (1979)應用混合型法的觀念在他們的雲模式。其方法是根據 Crowley 平流法 (Crowley, 1968)的改良。雖然這方法並不保證是正定義法，然而所產生的負值小得可忽略。此法較之 FCT 法有較大的數值消散，然而其所需的計算時間僅為 FCT 法的一半。

Smolarkiewicz 於 1983 提出一非線性平流正定義數值方法。其方法在校正階段利用 Taylor 級數導出反擴散(anti - diffusion)的過程，重新聚集預報階段上游法(up-stream scheme)所擴散出去的質量，減少極大值之衰減。以不同 Taylor 級數之階數求反擴散，Smolarkiewicz 法可分低階和高階法。Smolarkiewicz (1983, 1984, 1986)披露低階法的特性及一些應用，對於高階法的重要性，Smolarkiewicz 只用在三維平流的探討方面，他用高階法來避免低階法所造成的變形 (Smolarkiewicz 1984)。對於不同階次的平流方法之特性，Takacs (1985)及 Tremback et al. (1987)共同指出，奇數階的方法相位表現較好，偶數階的方法對振幅的維持較佳。Smolarkiewicz and Clark (1986)探討 Smolarkiewicz 法應用在水汽以外其他氣象變數的平流研究。一般而言 Smolarkiewicz 方法成功的應用於雲模式的水氣傳送，Hsu 和 Arakawa (1990)在以等熵座標模擬斜壓不穩定時，使用改良 Takacs (1985)法為正定義數值方法，並得到相當好的結果。

對於 Smolarkiewicz 及 Hsu - Arakawa 此二正定義數值方法之比較，並不存在於文獻中，而且高階法之定差數學式子描述，亦不夠詳盡。所以本文之目的在探討比較 Smolarkiewicz 和 Hsu - Arakawa 此二已在不同大氣模式模式成功的使用之正定義方法，並了解此二方法之優劣點及和傳統差分方法之得失效率。因為這些數值方法是非線性的，因此無法應用富氏線性分析，必須以數值計算來分析比較。本篇著重討論不同數學性質函數之平流及正定義法基本特性比較、收斂速度、極大值之保持、誤差、穩定度等問題。而此方法在多維空間之實際應用，以及交錯項 (cross - space partial derivative terms)之研究，將在續篇中，以二維計算描述。

總而言之，本文有三個目的，目的之一在補足文獻中沒有或不夠詳盡之正定義方法之特性 (包括 Smolarkiewicz 法(1983)及 Hsu and Arakawa (1990))，例如各方法之收斂速度、極大值和解析度之關係、 Δt 或 Courant no. 和各方法穩定度以及校正步驟次數之關係、校正步驟之次數以及正定義方法加減常數之探討等。本文的目的之二我們認為 Smolarkiewicz 高階法是一個重要的方法，但是在 Smolarkiewicz 之文獻中高階法的定差方程 (Smolarkiewicz (1984)之(35)、(36)式)有誤，而且其三階法只在 Smolarkiewicz (1984)文中出現一次，用以改善其本人用二階法處理三維平流所產生的變形。本文詳細敘述高階法以及其特性，而且我們亦提出一全新之混合階法，可以取代高階法，使 Smolarkiewicz 高階法在效率上有很大改進，所以高階法與混合階法之

敘述以及目的之一之探討，亦是本文的重點。本文的目的之三是在進行這些探討中，本文同時包括 Hsu - Arakawa 法及二階中差分法 (FD2) 與四階空間二階時間中差分法 (FD4)，詳細探討這些方法之比較。這些方法的優缺點比較，在已知文獻並不存在，此為本文目的之三。

本文中詳盡探討 Smolarkiewicz 低階及高階法和 Hsu-Arakawa 法在方形波、正弦波、高斯波及其他氣象變數的平流模擬。文章中第二節是研究方法概述，第三節是結果與討論，結論放在第四節。

二、研究方法概述

(一) 數學問題探討

我們的探討問題為保守或通量形式的一維平流方程式(1)

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

此方程為流體力學中，包含波動或平流之最簡單方程式。

(二) 初始條件之意義

在研究中我們以高斯波、正弦波以及方形波形為初始條件，進行探討。
高斯波之形式為

$$\psi(x, t = 0) = e^{-25x^2} + b \quad (2)$$

正弦波之形式為

$$\psi(x, t = 0) = \sin \pi x \quad (3)$$

而方形波之寬為 0.6，(2) 式中 b 值在研究中介於 0 到 1 之間。在平流研究之條件下，(2) (3) 式以及方形波代表完全不同數學性質之函數。(2) 式的高斯波是一無限連續之函數，在性質上近乎我們之流體，以及差分法泰勒展開之假設，因此我們以 (2) 式探討我們數值方法之收斂性。(3) 式之正弦波如 (2) 式，亦為無限連續之函數，唯其值正及負同時存在，在運用正定義法時，我們須先加上一常數，使其值全為正才能運算，並於運算後減去此常數；(2) 式常數 b 之研究目的，在於探討正定義法於非正定義值(如動量通量)之平流，或正定義量最小值不為零時(如溫度)平流的適用性。因為這些計算方法不是線性的，所以加減常數對計算值影響，無法事先預期。方形波的探討，是研究在函數不連續下的計算；這種不連續，可以在等熵模式中，等熵面和地表的交接點產生，在交接點的質量密度不連續，或是極小尺度的鋒面附近產生 (frontal scale - collapse)；因此我們也研究正定義方法對這類模擬之適用性。

(三) 計算方程推導

我們研究方法以 Hsu - Arakawa 法 (Hsu 和 Arakawa 1990)，以及不同階次的 Smolarkiewicz 方法為主 (Smolarkiewicz 1983，1984)。我們也包括了 FD2 及 FD4 及上游法來比較。

Smolarkiewicz 法是一非線性正定義法，含有預報-校正 (predictor - corrector) 兩個步驟。其原理是先以上游法作預報，然後推導出反擴散速度 (antidiffusion velocity) 以補償上游法導致的內部擴散 (implicit diffusion)。在校正階段以反擴散速度取代初始風場來當平流速度，再執行一次上游法。因為反擴散速度是一種輻合風場，可以使預報階段上游法擴散出去的質量，再度聚集回來，以減少極大值衰減。理論上校正步驟可以一再重覆計算執行，因為 Smolarkiewicz 法在預報及校正階段都使用上游法，所以保證是正定義方法。在使用 Smolarkiewicz 法時應注意的是，當重覆多次校正步驟時，除第一次的校正步驟外，均需由最近一次的反擴散速度來求新的反擴散速度，不可以每次都由初始風場來求反擴散速度。因為校正階段是用反擴散速度來當平流風場，所以其所含的內部擴散項的平流風場是反擴散速度。因此第二次校正階段的反擴散速度，須由第一次校正階段的反擴散速度來求得，依此類推。

當推導反擴散速度時，時間空間都以二階泰勒級數展開，我們稱作 Smolarkiewicz 低階法 (SML)，時間空間都以三階展開，則為 Smolarkiewicz 高階法 (SMH)，而時間用二階，空間用三階展開，我們叫它 Smolarkiewicz 混合階法 (SMM)。因為 SMM 是我們針對效率性 (SMM 的計算項數比 SMH 少) 所提出的，而且在 Smolarkiewicz 原始文獻中 (Smolarkiewicz 1983)，沒有提供 SMH 反擴散過程的一維形式，所以在本節，我們清楚的寫出 SMH 的推導過程，SMH 反擴散過程的推導，完全包含了 SML 及 SMM 的推導過程，因此在 SMH 反擴散過程的推導之後，我們詳列 SML、SMH 及 SMM 反擴散速度的一維方程，以供參考與比較。將 (1) 式以上游法定差化為

$$\psi_i^{n+1} = \psi_i^n - [F(\psi_i^n, \psi_{i+1}^n, u_{i+\frac{1}{2}}^n) - F(\psi_{i-1}^n, \psi_i^n, u_{i-\frac{1}{2}}^n)] \quad (4)$$

上標 n 是時間指標，下標 i 是空間網格點指標，這裡通量 F 為

$$F(\psi_i^n, \psi_{i+1}^n, u_{i+\frac{1}{2}}^n) = [(u_{i+\frac{1}{2}}^n + |u_{i+\frac{1}{2}}^n|)\psi_i^n + (u_{i+\frac{1}{2}}^n - |u_{i+\frac{1}{2}}^n|)\psi_{i+1}^n] \frac{\Delta t}{2\Delta x} \quad (5)$$

將 (5) 式代入 (4) 式可得

$$\begin{aligned} \psi_i^{n+1} = & \psi_i^n - \{[(u_{i+\frac{1}{2}}^n + |u_{i+\frac{1}{2}}^n|)\psi_i^n + (u_{i+\frac{1}{2}}^n - |u_{i+\frac{1}{2}}^n|)\psi_{i+1}^n] \\ & - [(u_{i-\frac{1}{2}}^n + |u_{i-\frac{1}{2}}^n|)\psi_{i-1}^n + (u_{i-\frac{1}{2}}^n - |u_{i-\frac{1}{2}}^n|)\psi_i^n]\} \frac{\Delta t}{2\Delta x} \end{aligned} \quad (6)$$

將 ψ^{n+1} ， $\psi_{i\pm 1}$ 以泰勒級數三階展開

$$\begin{aligned} \psi^{n+1} &= \psi^n + \frac{\partial \psi}{\partial t} \Delta t + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \psi}{\partial t^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \\ \psi_{i\pm 1} &= \psi_i \pm \frac{\partial \psi}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Delta x^2 \pm \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \Delta x^3 + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (7)$$

讓 u 保持常數，且將 (7) 式代入 (6) 式，整理後為

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \Delta t + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 \psi}{\partial t^3} \Delta t^2 = -u \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2} |u| \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Delta x - \frac{1}{6} u \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \Delta x^2 + O(\Delta t^3, \Delta x^3) \quad (8)$$

另外，由 (1) 式可得

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial^3 \psi}{\partial t^3} = -u^3 \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \quad (9)$$

以(9)式替換(8)式中的 $\partial^2 \psi / \partial t^2$ 及 $\partial^3 \psi / \partial t^3$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} u^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Delta t - \frac{1}{6} u^3 \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \Delta t^2 = -u \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2} |u| \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Delta x - \frac{1}{6} u \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \Delta x^2 + O(\Delta t^3, \Delta x^3) \quad (10)$$

將(10)式整理成

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + u \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_i^n = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2} (|u| \Delta x - u^2 \Delta t) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{1}{6} (u \Delta x^2 - u^3 \Delta t^2) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] \Big|_i^n \quad (11)$$

(11)式等號右邊，就是使用上游法所隱含的內部擴散項。當 $\Delta t, \Delta x$ 趨近於零，(11)式即為(1)式(一維平流方程式)，這說明Smolarkiewicz法保有數值方法的一致性(consistent或compatible；一致性的詳細定義，可以見Haltiner和Williams 1980第120頁)。進行反擴散過程，就是減去(11)式的內部擴散項，作法如下：

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2} (|u| \Delta x - u^2 \Delta t) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{1}{6} (u \Delta x^2 - u^3 \Delta t^2) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] = -\frac{\partial}{\partial x} (\tilde{u} \psi) \quad (12)$$

(12)式推導成類似(1)式(可繼續使用上游法)，也因此可得反擴散速度 \tilde{u} 為

$$\tilde{u} = \frac{1}{2} \frac{(|u| \Delta x - u^2 \Delta t) \frac{\partial \psi}{\partial x}}{\psi} - \frac{1}{6} \frac{(u \Delta x^2 - u^3 \Delta t^2) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}}{\psi} + O(\Delta t^3, \Delta x^3) \quad (13)$$

反擴散速度是一輻合風場，Smolarkiewicz在校正階段，以反擴散速度取代原來的平流風場(仍舊使用上游法)，將預報階段擴散出去的質量，重新聚集回來。因為SMH的反擴散過程是以泰勒級數三階展開，所以(13)式SMH的反擴散速度是三階精確度，式中大致有兩大項，第一大項是低階項(其為SML的反擴散速度，以泰勒級數二階展開即可得到)，第二大項是高階項(用泰勒級數三階展開才能得到)。SMM的時間用二階、空間用三階泰勒級數展開，沒有(9)式中的 $\partial^3 \psi / \partial t^3$ ，所以SMM比SMH少了一項(少了高階項的末小項)。SML、SMH及SMM的反擴散速度之公式，詳列如下：

a. Smolarkiewicz低階法(SML)

$$\tilde{u} = \frac{1}{2} \frac{(|u| \Delta x - u^2 \Delta t) \frac{\partial \psi^*}{\partial x}}{\psi^*} \quad (14)$$

b. Smolarkiewicz高階法(SMH)

$$\tilde{u} = \frac{1}{2} \frac{(|u| \Delta x - u^2 \Delta t) \frac{\partial \psi^*}{\partial x}}{\psi^*} - \frac{1}{6} \frac{(u \Delta x^2 - u^3 \Delta t^2) \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}}{\psi^*} \quad (15)$$

c. Smolarkiewicz混和階法(SMM)

$$\tilde{u} = \frac{1}{2} \frac{(|u| \Delta x - u^2 \Delta t) \frac{\partial \psi^*}{\partial x}}{\psi^*} - \frac{1}{6} \frac{(u \Delta x^2) \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}}{\psi^*} \quad (16)$$

其中 ψ^* 是預報階段所得的質量場 (ψ)，反擴散過程是在校正階段，利用反擴散速度，重新聚集預報階段擴散出去的質量。在反擴散速度的計算方面，SMM 比 SMH 少算一項，其餘項次都相同。在實際計算中，我們採用 C 網格，將偏微分方程，如 Smolarkiewicz (1983, 1984) 以二階方法定差化，以 (15) 式 SMH 之 $i + \frac{1}{2}$ 網格點上的反擴散速度 $\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}$ 為例，可寫成

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i+\frac{1}{2}} = & \frac{(|u_{i+\frac{1}{2}}| \Delta x - (u_{i+\frac{1}{2}})^2 \Delta t) (\psi_{i+1}^* - \psi_i^*)}{\Delta x (\psi_{i+1}^* + \psi_i^* + \epsilon)} \\ & - \frac{1}{3} (u_{i+\frac{1}{2}} \Delta x^2 - (u_{i+\frac{1}{2}})^3 \Delta t^2) \times \frac{(\psi_{i+2}^* + \psi_{i-1}^* - \psi_{i+1}^* - \psi_i^*)}{\Delta x^2 (\psi_{i+2}^* + \psi_{i-1}^* + \psi_{i+1}^* + \psi_i^* + \epsilon)} \end{aligned} \quad (17)$$

詳細的 Smolarkiewicz 法 (如何進行預報階段，與校正階段如何重覆)，以及各階次 (SML、SMH、SMM) 的反擴散速度之一維定差形式，請參考附錄甲。

Hsu - Arakawa 法是根據 Takacs (1985) 發展而來的一三階精確度非線性的方法。其方法有相當複雜的校正階段計算，其校正理念是以控制通量為根本，例如當一格點的值若為零時，其向外的通量設定為零，而進來的通量不為負值所發展而來。校正步驟中 $\gamma_{i+\frac{1}{2}}^+$ 及 $\gamma_{i+\frac{1}{2}}^-$ 的計算可以有一次方項、二次方項、四次方項三種不同的運用，一次方項的我們稱之為 HA1，二次方項為 HA，四次方項為 HA4。不同運用的定差格式及 Hsu - Arakawa 法的詳細計算步驟請參考附錄乙。

為了比較起見，我們亦包含 FD4、FD2 之中差分法 (參見郭等 1990)。

d. 一維 FD4 的公式

(1) 式可定差化成

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial t} = - \left(\frac{9}{8} \delta_x F_i - \frac{1}{8} \delta_{3x} F_i \right) \quad (18)$$

其中

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \left[\frac{9}{16} (\psi_{i+1} + \psi_i) - \frac{1}{16} (\psi_{i+2} + \psi_{i-1}) \right] u_{i+\frac{1}{2}} \quad (19)$$

而

$$\delta_x F_i = \frac{F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x}, \quad \delta_{3x} F_i = \frac{F_{i+\frac{3}{2}} - F_{i-\frac{3}{2}}}{3\Delta x} \quad (20)$$

e. 一維 FD2 的公式

(1) 式可定差化成

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial t} = - \delta_x F_i \quad (21)$$

其中

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\psi_{i+1} + \psi_i}{2} u_{i+\frac{1}{2}} \quad (22)$$

4. 計算參數

取周期性邊界，研究範圍 $x \in [-1, 1]$ ，平流速度 $u = 1$ ， $\Delta x = 1/16$ ， $\Delta t = 1/160$ ，CFL 數 (C) = 0.1。為了使平流結果的誤差來自空間差分，我們使用很小的 Δt 。繞一圈需 320 積分次數。

三、結果與討論

(一) 高斯波之探討

圖1是Smolarkiewicz低階法一維高斯波形繞一圈的結果，預報階段的上游法有很強的內部擴散作用，中心強度繞一圈後已不及原來的一半(原極大值之38%)。經由校正階段一次、二次、三次(SML1、SML2、SML3)，都能將上游法擴散出去的質量再度聚集起來，作一次及兩次的校正步驟，所聚集回來的質量較顯著，作三次的校正結果和兩次的校正結果相去不遠，也就是說作三次校正較不合乎效率的原則。由研究中得知(此處未列)，反擴散速度是一幅合風場，第一次校正階段的通量幅合大小較第二次校正階段的通量幅合大小大一個數量級，第二次的大比第三次的大一至二個數量級以上，所以由通量幅合的大小變化，也可看出為何三次校正量不大。另外圖1也指出Smolarkiewicz低階法所有的校正階段(SML1、SML2、SML3)有相同的相位偏移，相位都往上游方向偏移，不過上游法的相位沒有偏移。而雖然校正步驟聚集回來一些質量，圖1仍然明白的顯示Smolarkiewicz低階法有明顯的衰減情形，波形繞一圈後SML2和原來的解析解有明顯的差距(繞一圈320時距後，維持原極大值之80%)

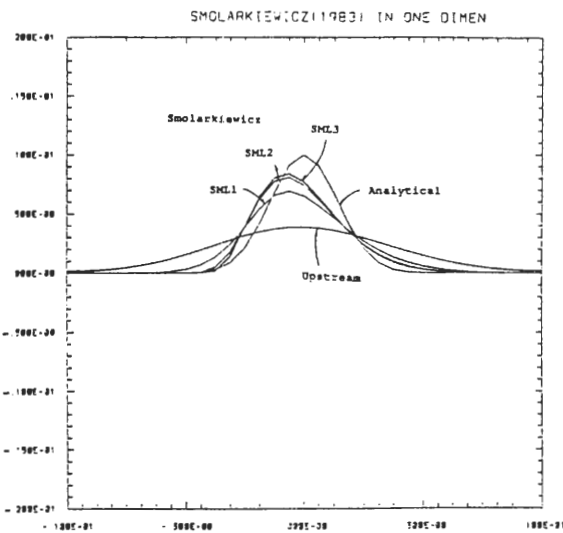


圖1 上游法及SML1、SML2、SML3高斯波形繞一圈的結果， $\Delta x = \frac{1}{16}$ ， $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。

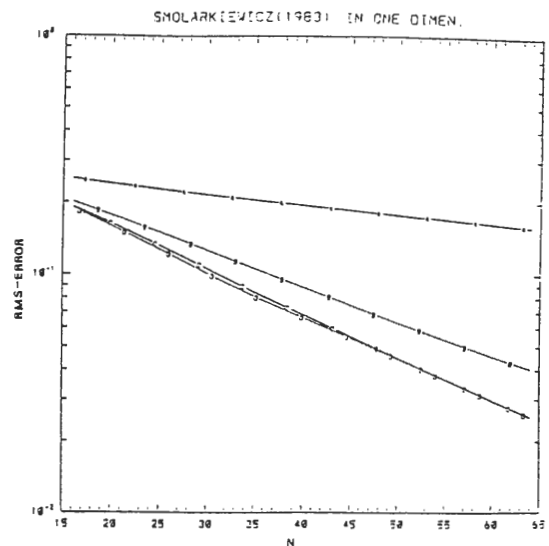


圖2 Smolarkiewicz低階法的收斂探討，A線是預報階段(即上游法)，B、C、D線是SML1、SML2、SML3的結果， $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。

圖2是Smolarkiewicz低階法一維的收斂探討，隨著解析度的增加，RMS (Root - Mean - Square) 誤差減小，亦即精確度提高。圖中的A線是上游法，B、C、D線分別是SML1、SML2、SML3的結果，經由校正步驟後精確度有明顯的提高，圖中亦明白的指出三次校正的不必要，尤其在高解析度下時，SML2和SML3的精確度幾乎完全一樣。

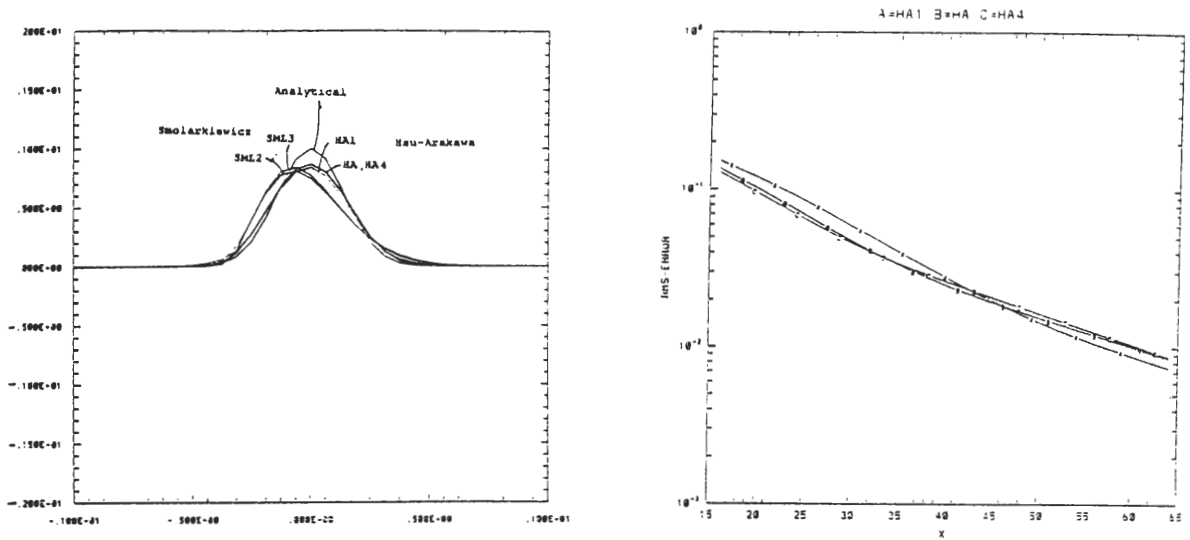


圖 3 a. HA1、HA、HA4 及 SML2、SML3 高斯波形繞一圈的結果， $\Delta x = \frac{1}{16}$ ， $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。
b. Hsu-Arakawa 法的收斂探討，A、B、C 線分別是 HA1、HA、HA4。

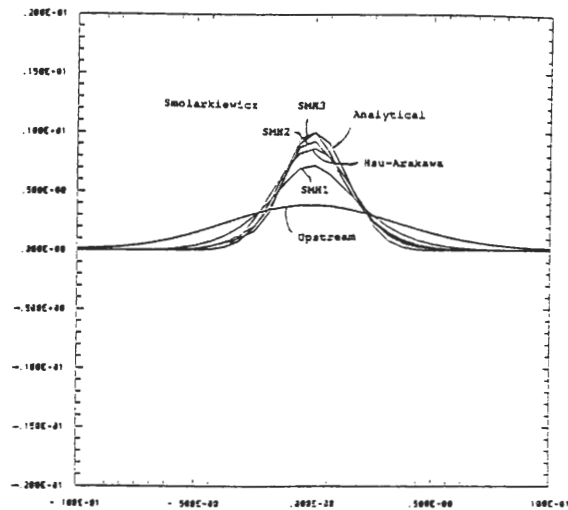


圖 4 SMH1、SMH2、SMH3 及 HA 一維高斯波形繞一圈的結果。

Hsu - Arakawa 法是一三階精確度非線性平流法，其一維研究的結果見圖 3a，圖中也納入 SML2、SML3 的結果一起比較。三種 Hsu - Arakawa 法 (HA1、HA、HA4) 相位幾乎沒有任何偏移，而振幅維持方面 (各為原極大值之 84%、86.5%、86.8%) 顯示 HA 和 HA4 的結果幾乎一樣。SML2、SML3 振幅的維持 (80%、84%) 略遜於 Hsu - Arakawa 法，然而 Smolarkiewicz 法及 Hsu - Arakawa 法一樣存在有明顯振幅減弱的現象。收斂探討之圖 3b 顯示三種 Hsu - Arakawa 法

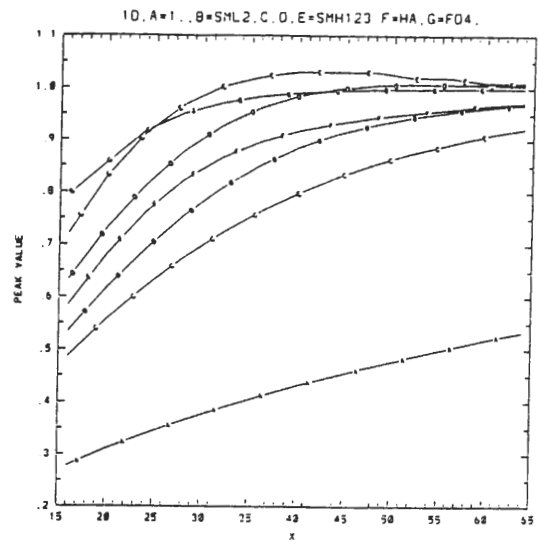
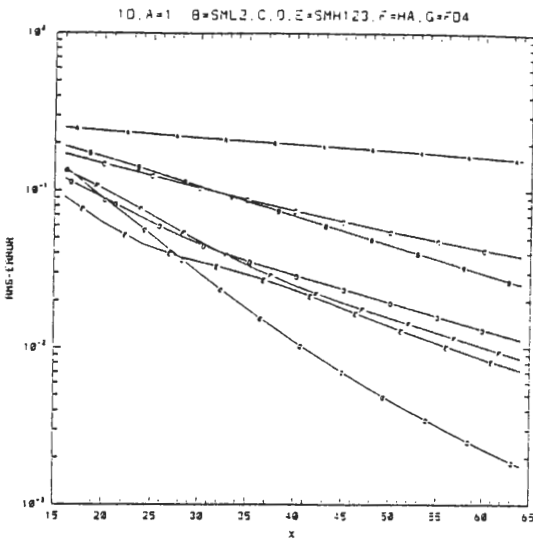


圖5 a. 一維收斂探討，A線是上游法，B線是SML2，C、D、E線分別是SMH1、SMH2、SMH3，F線是HA，G線是FD4。
b. 是高斯波形繞一圈後中心極值的維持情形，各線條所代表的方法和圖5a同。

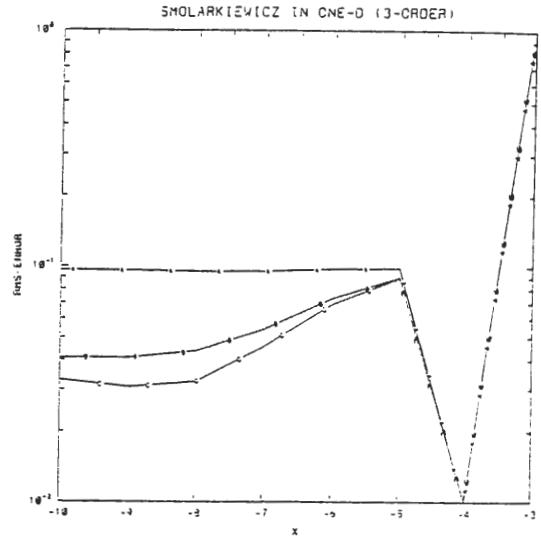
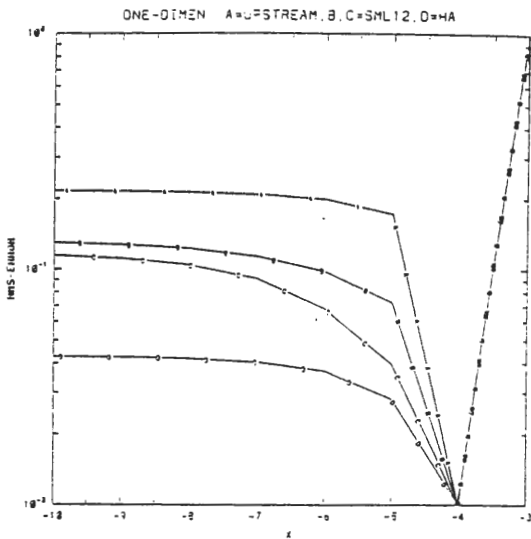


圖6 上游法(A線) SML1、SML2 (B、C線)，HA (D線)的穩定度探討， $\Delta x = \frac{1}{16}$ 。

圖7 SMH1、SMH2、SMH3 (A、B、C線)的穩定度探討， $\Delta x = \frac{1}{16}$ 。

(A、B、C線分別指HA1、HA、HA4)的結果大致一樣，尤其HA和HA4可視為同樣的方法。

圖4是Smolarkiewicz高階法一維高斯波形繞一圈的結果,高階法的相位沒有偏移,而低階法的相位有明顯的往上游偏移的情形(見圖1)。SMH3的結果,振幅強度幾乎和解析解的一樣,圖中也納入HA的結果,SMH2的振幅大小(原極大值之93%)就比HA法(86.5%)來得好。高階法一次校正後,就有很好的振幅大小(原極大值之72%)。圖5a綜合一至四階多種平流數值方法的收斂探討結果,A線是上游法,B線是SML2,C、D、E線是SMH1、SMH2、SMH3,F線是HA,G線是FD4。四組線(A線一組,B、C線一組,D、E、F線一組,G線一組)明白的表現出一至四階的特性。SMH3(E線)比HA(F線)有較高的精確度。SMH2(D線)在中低解析度以下($N = 32$ 之下),也比HA來得好。SMH1(C線)尚無法表現出三階數值方法的精確度,和SML2(B線)相近,是二階的表現。圖中也明白的指出,高階法第三次校正是值得執行的,它比二次校正明顯的有增加更多精確度,而低階法只值得執行二次校正(見圖2)。另外圖3a指出SML2極大值的維持和HA的相去不遠,然而圖5a顯示HA是一三階精確度的方法,而SML2只有二階精確度,原因在於SML2的相位誤差太大,拉低了精確度。圖5b是高斯波形繞一圈後極大值的維持情形,各條線所代表的方法和圖5a同。SMH3及FD4對中心極大值的維持最好($N = 23$ 以上(對高斯波的解析約是 $4.6\Delta x$ 以上)),就能維持原極大值的90%),此外,各方法依表現好壞依序為SMH2、HA、SML2、SMH1($N = 30$ 、 $N = 37$ 、 $N = 42.5$ 、 $N = 57.5$ 以上)($6\Delta x$ 、 $7.4\Delta x$ 、 $8.5\Delta x$ 、 $11.5\Delta x$ 以上)。三階精確度的HA和二階精確度SML2的中心極值維持約相當,所以如果SML2沒有明顯的相位誤差有很好的相位,SML2很可能是三階精確度的數值方法。此外,SMH3中心極值有過多的現象。除了收斂探討可以明白顯示平流數值方法精確度高低的特性外,我們也很想知道各方法的穩定度限制。線性數值平流方法的穩定度限制可以由理論上來推導,然而非線性平流方法的穩定度限制並無簡單理論解,我們藉由數值計算來探討非線性平流方法的穩定度特性。圖6是上游法(A線),SML1、SML2(B、C線)、HA法(D線)的穩定度數值探討。固定水平解析度($N = 32$), $\Delta t = 2^n$ 隨 x 軸向右 Δt 以倍數方式增加。當 $\Delta t = 2^{-4}$ Courant數恰為1。在Courant數=1的情況下,圖中各方法(SMM除外)都不需要作內插,所以可以得很高的精確度約為 10^{-9} ,為了繪圖的方便我們只以 10^{-2} 來表示。圖中三種方法,在穩定度的限制內,使用較大的 Δt 反而得到更高的精確度。圖7是Smolarkiewicz高階法一至三次校正(A、B、C線)的穩定度探討。和低階法不同,也和Hsu-Arakawa法不同,Smolarkiewicz高階法似乎要使用較小的時距($\Delta t \sim 2^{-9}$)($C \sim 2^{-5}$)才能得到較佳的精確度。

Smolarkiewicz混合階法的平流模擬和高階法的結果幾乎完全相同,混合階法比高階法少計算一項(此項為CFL no.的平方項,而Smolarkiewicz法所使用的CFL no.須小於1,所以省去此項不影響結果,詳細請見附錄甲),所以計算時間較高階法少,是較具效率性的方法。Smolarkiewicz法是歐勒法,時距大小受限於穩定度,本章取 $C=0.1$,使數值誤差大都來自空間差分,在 $C=0.1$ 的情況之下,時間差分取二階(SMM)或是取三階(SMH),結果的差異當然不大。當 C 值較大時,SMM和SMH的差別就會顯現出來,然而Smolarkiewicz法必須 $C < 1$,在 $C < 1$ 之下,SMM的結果不會和SMH有很大的差異。

(二)高斯波加常數之探討

此研究之目的在於應用正定義方法對於水汽以外其他氣象變數的平流模擬,水汽的空間分佈變化很大,能夠將水汽的平流處理得很好的方法,對於水汽以外其他氣象變數的平流處理情形如何,是我們所關心的。水汽除了空間分佈變化大以外,沒有水汽的地方其場值便為零,這

和其他氣象變數有所不同，氣象變數如高度場，溫度場極小值並不為零。因此正定義法應用在其他氣象變數的探討，首先便是改變研究場的極小值。圖8是HA、HA4及FD4對於最低場值為0.5（原極值之50%）之高斯波形繞一圈的結果（繪圖時先減去0.5）。FD4因為是線性的，得到和原來最低場值為零時相同的結果。HA及HA4在上游方向產生負值（原高斯波極值之1%）。圖9和圖8同，唯是Smolarkiewicz法，SMH產生負值的大小較小，約是 -10^{-3} （原高斯波極值之0.1%），低階法的負值不但較高階法為大，且隨著校正次數的增加，負區變大且負值變大（最大至原高斯波極值之10%）。圖10的曲線圖明白指出文中所探討的正定義法，在最低場值不再為零時的一些特性。 x 軸指的是(2)式之 b 值，也就是最低場值為高斯波形極大值的倍數。A、D線是SMH3，B、E線是SML2，C、F線是HA，A、B、C線是RMS誤差，D、E、F線是 $|\psi_{min}|$ 最大負值的絕對值。各種方法在最小場值有變化時（隨 x 軸增減），RMS誤差並沒有明顯變化。在 $|\psi_{min}|$ 方面，圖中指出SMH3的負值最小約 -10^{-3} （原高斯波極值之0.1%），HA次之約 -10^{-2} （原高斯波極值之1%），SML2的負值有 -10^{-1} （原高斯波極值之10%）大小，且SMH3明顯的隨 x 值的增加，負值變小，而SML2則反之，隨 x 軸負值變大，HA不隨 x 軸變化。總之，在最小場值不為零的探討下SMH3仍是最優秀的方法。然而Smolarkiewicz法及Hsu - Arakawa法在最低場值不為零的情況下，其平均結果都產生負值，都不再是正定義法。以精確度而言，所加之常數對各方法無多大影響。

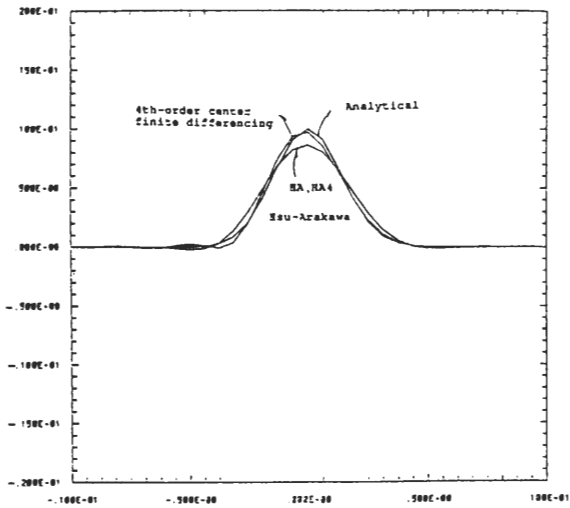


圖8 HA、HA4和四階定差法對於基本場是高斯波形加0.5繞一圈的結果， $\Delta x = \frac{1}{16}$ ， $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。

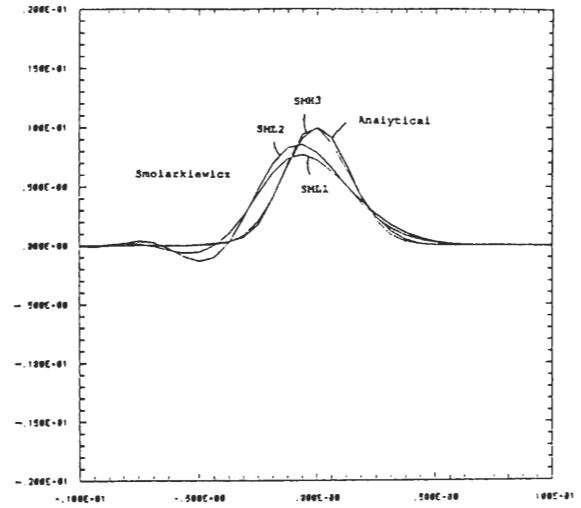


圖9 和圖8同，惟是Smolarkiewicz高低階法。

(三)對於正弦波的平流模擬

在正弦波的平流模擬方面，因為正弦函數值範圍由-1至+1，涵蓋有正、負的值對於這種

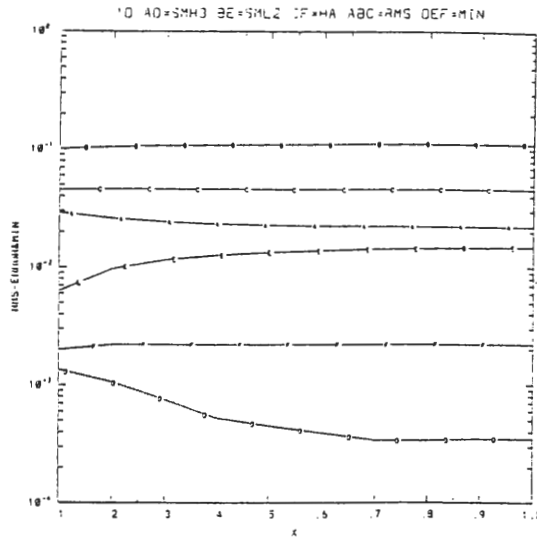


圖 10 RMS 誤差以及 $|\phi_{min}|$ 極小值，其中 SMH3 (A、D 線)，SML2 (B、E 線)，HA (C、F 線)，RMS 誤差 (A、B、C 線) 及 $|\phi_{min}|$ (D、E、F 線)，橫軸 x 指最低場值為高斯波形極大值的 x 倍。

有正、負場值的平流，Smolarkiewicz 法及 Hsu - Arakawa 法都有不穩定的狀況出現，必需將整個場加上一個值 (如加上 1 或 -1)，使整個場全部為正，或是全部為負，平流模擬才會穩定。線性的 FD2 或是 FD4 對於有正負場值的平流則不受影響，和全為正或是全為負的平流結果一樣，不會有不穩定的現象發生。

圖 11 是 SML2、SMH3 及 HA、HA1 對正弦二波繞一圈的結果。SML2 相位偏移，SMH3 及 HA、HA1 相位正確，SML2 及 HA、HA1 振幅衰減在波峰約相同，SMH3 在波峰有比解析解還大的現象 (over - shoot)，在波谷的振幅衰減則和 SML2 約相同。HA 在波谷的振幅衰減比 SMH3、SML2、HA1 來的小。圖 12 是 FD2 及 FD4 對正弦二波繞一圈的結果，FD2 的相位往上游方向偏移且振幅衰減很小，FD4 的結果很好幾乎和解析解重疊。正弦波的平流模擬結果大致是和高斯波形的平流模擬結果一致，只是 FD4 在正弦波的模擬，比在高斯波形的平流模擬得較高的精確度。

關於正弦波繞一圈的收斂情形見圖 13，圖中 A 線是 SML2，B 線是 SMH3，C 線是 HA，D 線是 FD2，E 線是 FD4。 x 軸表網格點數 N 。對同一波數而言，解析度增加一倍 (如 x 值由 25 到 50) SML2、SMH3 及 HA 和 FD2 (A、B、C、D 線)，精確度只會增加 3 ~ 4 倍，然而 FD4 (E 線) 在解析度增加一倍後，精確度則增加 10 倍以上。

(四) 對於方形波的平流模擬

圖 14a 是 HA、HA1 及 SML1 對方形波繞一圈的結果，三者都能保持波形為正值，對於不連續點的地方尚無法表現得很好，對方形波的平頂都有過多的現象，HA 比 HA1 稍許多，多校正一次 SML2 會比 SML1 大 (此處未列)。圖 14b 是 SMH1、SMH3 對方形波繞一圈的結果，對方形波的平頂過多的現象，SMH3 比 SMH1 多很多。SMH 對方形波的平流模擬結果和 SML 相似。

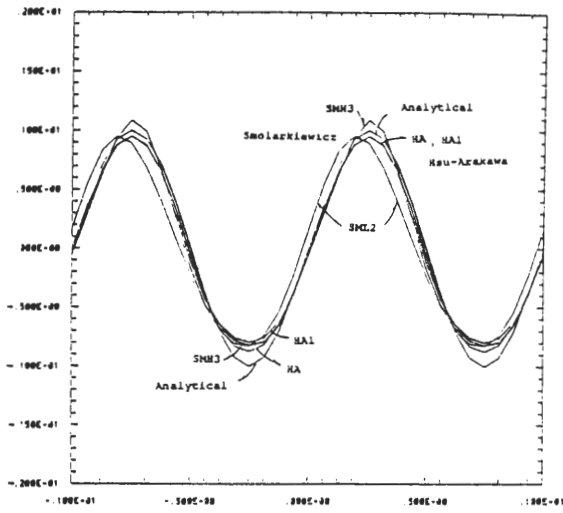


圖 11 SML2、SMH3 及 HA、HA1 對正弦二波繞一圈的結果。

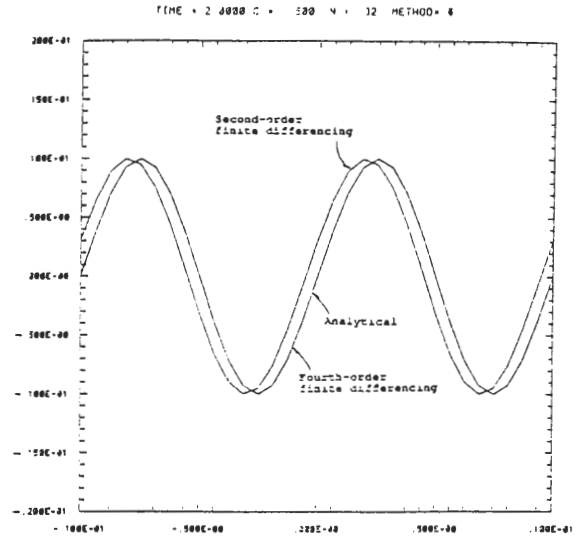


圖 12 FD2 及 FD4 對正弦二波繞一圈的結果， $\Delta x = \frac{1}{16}$ ， $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。

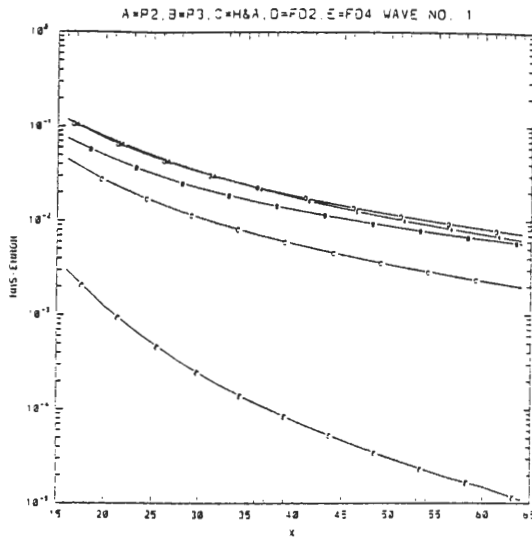


圖 13 正弦波繞一圈的收斂探討結果，A 線是 SML2，B 線是 SMH3，C 線是 HA，D、E 線是 FD2 及 FD4。橫軸是網格點數 N ，縱軸是均方根誤差 (RMS error)， $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。

FD4 對方形波的模擬見圖 15，表現不盡理想，FD4 是一線性的定差法，泰勒展開無法處理不連續點的地方，再加上 FD4 自身的計算頻散 (computational dispersion) 導致圖 15 得到相當混亂的

結果。圖 16 是各方法對方形波繞一圈的收斂探討，A 線是 FD4，B 線是 Hsu - Arakawa 法 (HA)，C 線是 SML2，D 線 SMH3。隨著解析度的增加，精確度並沒有明顯收斂增加 (B、C、D 線)，Hsu-Arakawa 法及 Smolarkiewicz 法雖然都是非線性的方法，然而他們都是泰勒展開法的應用，泰勒展開並不適用在不連續點 (方波的轉角處) 的地方，因此對於方波的模擬呈現低效率性。FD4 (A 線) 完全無法模擬方形波的平流，對於存在有不連續處的形體，線性的 FD4 完全無法掌握，其收斂探討 (A 線) 呈水平狀。

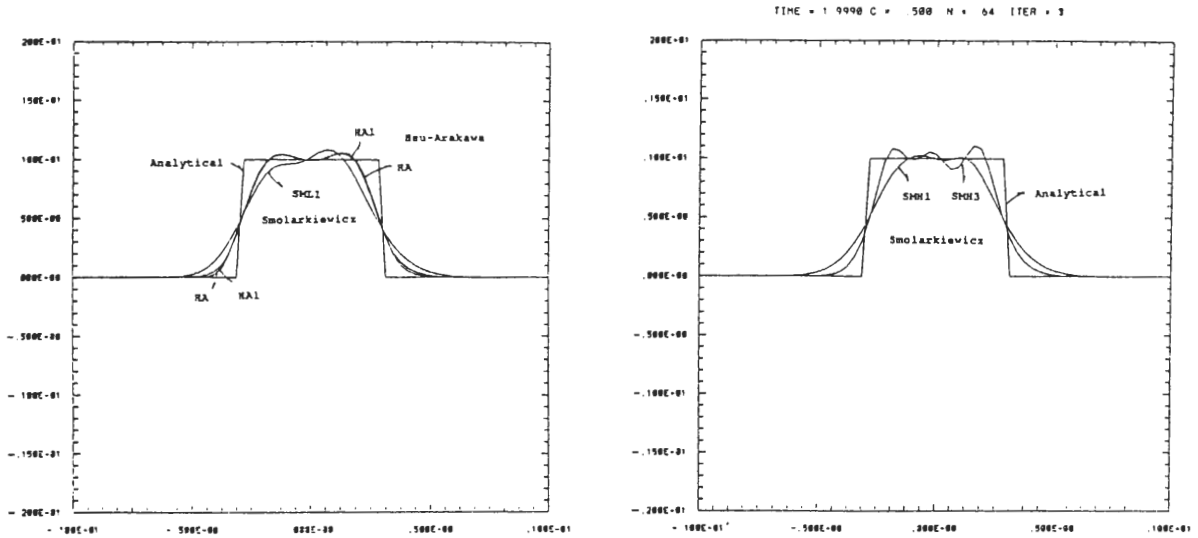


圖 14 a. HA、HA1 及 SML1 對方形波繞一圈的結果， $\Delta x = \frac{1}{16}$, $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。
b. SMH1 及 SMH3 對方形波繞一圈的結果， $\Delta x = \frac{1}{16}$, $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。

四、結論

在大氣科學中，污染物、水汽、位渦等之平流，因其物理量牽涉較強梯度及較小尺度，以目前一般常用之計算方法處理平流，會使本應正值之物理場產生不合理之負值；這在梯度強的地方尤其明顯。尋求合適的正定義平流數值計算方法，以應用在大氣科學方面，是本文研究之目的。而此方法在多維空間之實際應用，以及交錯項 (cross-space partial derivative terms) 之影響，將在續篇中，以二維計算比較描述。

本文對 Smolarkiewicz 低階法、高階法和 Hsu-Arakawa 法的在不同數學性質之函數下之平流作用的基本特性，以一維計算作了詳盡的探討，所得的重要結論歸納如下：

1. 在高斯波的探討方面，Smolarkiewicz 低階法，其相位會往上游方向偏移。而高階法及 Hsu-Arakawa 法則產生沒有偏移的相位。根據我們的研究，低階法校正步驟最多只須執行兩次，而高階法最多只須執行三次校正步驟。高階法更是在所探討的正定義方法中振幅維持最好的，其 SMH3 振幅強度和解析解相近 (過多不超過 3%)。SMH2 的振幅為原高斯波極大值之 93%，SMH1 只能保有和二階時間空間中差法相近的精確度。SML2 的振幅 (原極大值之 80%) 遜於 HA (原極大值之 86.5%)。

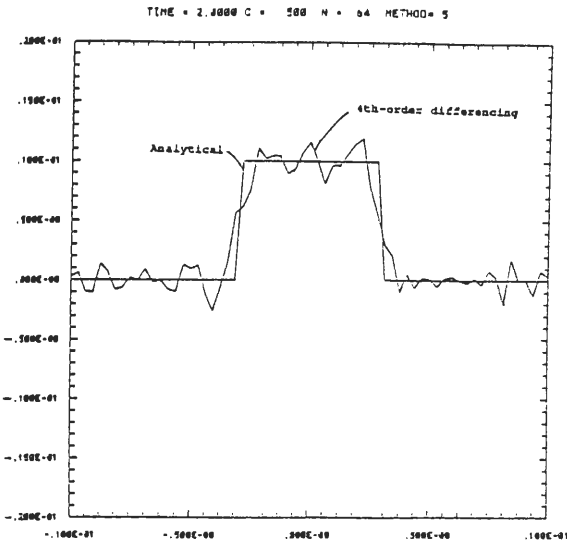


圖 15 FD4 對方形波繞一圈的結果， $\Delta x = \frac{1}{16}$ ， $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。

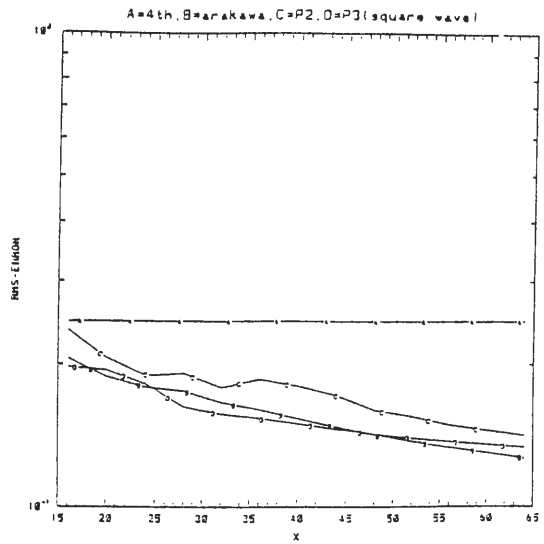


圖 16 方形波繞一圈的收斂探討，A 線是 FD4，B 線是 HA，C 線是 SML2，D 線是 SMH3。縱軸是誤差，橫軸是網格點 N ， $\Delta t = \frac{1}{160}$ 。

2. Smolarkiewicz 混合階法的平流結果和高階法的結果幾乎相同，因混合階法計算項較少，我們認為 Smolarkiewicz 混合階法是具有可用於大氣預報模式的高精確度、高效率的正定義方法。
3. Hsu-Arakawa 法和 Smolarkiewicz 法對於有正負場值的波形(如正弦波)的平流都會產生不穩定，因為這些方法都是在假設所平流的是正值的前題下導出的，必須將全場變成全為正或全為負後，平流才會穩定。以高斯波加常數之計算，加減常數後，文中所探討的正定義法則不再是正定義平流數值計算方法。Hsu-Arakawa 法及 Smolarkiewicz 法在上游方向會產生負值，高階法的最大負值是原極大值之 0.1%，Hsu-Arakawa 法約是原極大值的 1%，低階法約為 10%。以精確度而言，所加減之常數大小對各方法無多大影響。
4. Hsu - Arakawa 方法之形式非唯一的，其 $\gamma_{i+\frac{1}{2}}^+$ 及 $\gamma_{i+\frac{1}{2}}^-$ (見附錄乙) 可以一次方項 (HA1) (如徐月娟博士論文)、二次方項 (HA) (如 Hsu 和 Arakawa (1990))、四次方項 (HA4) (徐月娟博士私下指出) 出現。我們比較此三種方法 (從未在任何文獻出現)，發現這些方法的結果都很近似，它們的收斂速度皆類似皆為三階收斂。而且 HA 與 HA4 兩者結果相近可視為同一種方法，兩者的極大值僅比 HA1 大 2.5%。
5. 在方形波的探討方面，Hsu - Arakawa 及 Smolarkiewicz 法都呈現低效率性。在收斂探討上都沒有收斂，但其可以產生視覺上正確之結果，而傳統差分法在處理方形波是完全無能為力。

附錄甲：Smolarkiewicz 法一維定差方程

附錄甲詳列一維 Smolarkiewicz 法的運算程序，及本文所有 Smolarkiewicz 法 (SML、SMH 與 SMM) 反擴散速度的定差方程。Smolarkiewicz 法是以預報子及校正子的型式表示。我們先將一維平流方程式 (1) 定差化

預報子：

$$\psi_i^* = \psi_i^n - \Delta t (\delta_x F_i) \quad (\text{A.1})$$

$$\delta_x F_i = \frac{F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} \quad (\text{A.2})$$

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{(u_{i+\frac{1}{2}} + |u_{i+\frac{1}{2}}|)}{2.0} \psi_i^n + \frac{(u_{i+\frac{1}{2}} - |u_{i+\frac{1}{2}}|)}{2.0} \psi_{i+1}^n \quad (\text{A.3})$$

校正子： $1 \leq m \leq M$

$$\psi_i^{(m)*} = \psi_i^{(m-1)*} - \Delta t (\delta_x F_i^{(m)*}) \quad (\text{A.4})$$

$$\psi_i^{n+1} = \psi_i^{(M)*} \quad (\text{A.5})$$

$$F_{i+\frac{1}{2}}^{(m)*} = \frac{(\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m)} + |\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m)}|)}{2.0} \psi_i^{(m-1)*} + \frac{(\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m)} - |\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m)}|)}{2.0} \psi_{i+1}^{(m-1)*} \quad (\text{A.6})$$

上標 n 是指積分過程中第 n 個時階。根據 Smolarkiewicz (1983) 指出，爲了改進結果，校正子的階段可反覆運作。在預報階段對 ψ^{n+1} ， $\psi_{i\pm 1}$ 時間或空間以泰勒級數展開，可推導出反擴散速度 \tilde{u} 。 $\tilde{u}^{(m)}$ 指第 m 次校正所得出的反擴散速度， $\tilde{u}^{(0)} = u$ (爲預報階段的平流風場)， $\psi_i^{(m)*}$ 指第 m 次校正後的 ψ_i 值，若是最後一次校正， $\psi_i^{(M)*}$ 即爲 ψ_i^{n+1} ，而 $\psi_i^{(0)*} = \psi_i^*$ (預報階段的 ψ_i 值)， $F_{i+\frac{1}{2}}^{(m)*}$ 指第 m 次校正後的通量。

當推導出反擴散速度時間、空間都以二階展開即是所謂 Smolarkiewicz 低階法 (SML)，當時間、空間都以三階展開，我們稱作 Smolarkiewicz 高階法 (SMH)，當時間以二階展開，空間以三階展開，我們叫它 Smolarkiewicz 混合階法 (SMM)。SML、SMH 以及 SMM 的反擴散速度的定差方程分列如下：

1. Smolarkiewicz 低階法 (SML): $1 \leq m \leq M$

$$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m)} = (|\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)}| \Delta x - (\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)})^2 \Delta t) \cdot \frac{(\psi_{i+1}^{(m-1)*} - \psi_i^{(m-1)*})}{\Delta x (\psi_{i+1}^{(m-1)*} + \psi_i^{(m-1)*} + \varepsilon)} \quad (\text{A.7})$$

2. Smolarkiewicz 高階法 (SMH): $1 \leq m \leq M$

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m)} &= (|\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)}| \Delta x - (\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)})^2 \Delta t) \times \frac{(\psi_{i+1}^{(m-1)*} - \psi_i^{(m-1)*})}{\Delta x(\psi_{i+1}^{(m-1)*} + \psi_i^{(m-1)*} + \varepsilon)} \\
&\quad - \frac{1}{3}(\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)} \Delta x^2 - (\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)})^3 \Delta t^2) \times \frac{(\psi_{i+2}^{(m-1)*} + \psi_{i-1}^{(m-1)*} - \psi_{i+1}^{(m-1)*} - \psi_i^{(m-1)*})}{\Delta x^2(\psi_{i+2}^{(m-1)*} + \psi_{i-1}^{(m-1)*} + \psi_{i+1}^{(m-1)*} + \psi_i^{(m-1)*} + \varepsilon)} \\
&= (|\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)}| \Delta x - (\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)})^2 \Delta t) \frac{(\psi_{i+1}^{(m-1)*} - \psi_i^{(m-1)*})}{\Delta x(\psi_{i+1}^{(m-1)*} + \psi_i^{(m-1)*} + \varepsilon)} \\
&\quad - \frac{1}{3}\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)}(1 - (\tilde{C}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)})^2) \times \frac{(\psi_{i+2}^{(m-1)*} + \psi_{i-1}^{(m-1)*} - \psi_{i+1}^{(m-1)*} - \psi_i^{(m-1)*})}{(\psi_{i+2}^{(m-1)*} + \psi_{i-1}^{(m-1)*} + \psi_{i+1}^{(m-1)*} + \psi_i^{(m-1)*} + \varepsilon)}
\end{aligned} \tag{A.8}$$

這裏 $\tilde{C}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)} = \tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)} \Delta t / \Delta x$

3. Smolarkiewicz 混合階法 (SMM): $1 \leq m \leq M$

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m)} &= (|\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)}| \Delta x - (\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)})^2 \Delta t) \times \frac{(\psi_{i+1}^{(m-1)*} - \psi_i^{(m-1)*})}{\Delta x(\psi_{i+1}^{(m-1)*} + \psi_i^{(m-1)*} + \varepsilon)} \\
&\quad - \frac{1}{3}(\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{(m-1)} \Delta x^2) \times \frac{(\psi_{i+2}^{(m-1)*} + \psi_{i-1}^{(m-1)*} - \psi_{i+1}^{(m-1)*} - \psi_i^{(m-1)*})}{\Delta x^2(\psi_{i+2}^{(m-1)*} + \psi_{i-1}^{(m-1)*} + \psi_{i+1}^{(m-1)*} + \psi_i^{(m-1)*} + \varepsilon)}
\end{aligned} \tag{A.9}$$

SMH的計算項次，完全包含SMM及SML的計算項次，而SMM的計算項次，則包含了SML的計算項次。SMH有四項的計算項次，SMM的計算項為三項，SML計算項次最少，只有兩項。參種階次計算反擴散速度裡面，每種階次都有相同的第一項及第二項，這裡 $\varepsilon = 10^{-15}$ 。

附錄乙：Hsu-Arakawa 法一維定差方程

Hsu - Arakawa 法是以預報子及校正子的型式表示。將一維平流方程式(1)定差化如下：

預報子：

$$\psi_i^* = \psi_i^n - \Delta t(\delta_x F_i) \tag{B.1}$$

$$\delta_x F_i = \frac{F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} \tag{B.2}$$

$$F_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}}^+ \psi_i^n + u_{i+\frac{1}{2}}^- \psi_{i+1}^n \tag{B.3}$$

$$u_{i+\frac{1}{2}}^+ = \frac{(u_{i+\frac{1}{2}} + |u_{i+\frac{1}{2}}|)}{2.0} \tag{B.4}$$

$$u_{i+\frac{1}{2}}^- = \frac{(u_{i+\frac{1}{2}} - |u_{i+\frac{1}{2}}|)}{2.0} \tag{B.5}$$

校正子：

$$\psi_i^{n+1} = \psi_i^* - \Delta t(\delta_x F_i^*) \quad (\text{B.6})$$

$$F_{i+\frac{1}{2}}^* = u_{i+\frac{1}{2}}^+ \left(\frac{\psi_{i+1}^* + \psi_i^n}{2.0} \right) + u_{i+\frac{1}{2}}^- \left(\frac{\psi_i^* + \psi_{i+1}^n}{2.0} \right) + G_{i+\frac{1}{2}} \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} G_{i+\frac{1}{2}} = & -\alpha_{i+\frac{1}{2}} [u_{i+\frac{1}{2}}^+ \beta_{i+\frac{1}{2}}^+ (\psi_{i+1}^* - \psi_i^n) - \hat{u}_{i+\frac{1}{2}}^+ \hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}}^+ (\psi_i^* - \psi_{i-1}^n)] \\ & + u_{i+\frac{1}{2}}^- \beta_{i+\frac{1}{2}}^- (\psi_i^* - \psi_{i+1}^n) - \hat{u}_{i+\frac{1}{2}}^- \hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}}^- (\psi_{i+1}^* - \psi_{i+2}^n) \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1 + |u_{i+\frac{1}{2}}| \frac{\Delta t}{\Delta x}}{6.0} \quad (\text{B.9})$$

$$\beta_{i+\frac{1}{2}}^\pm = \frac{1 - 2\alpha_{i+\frac{1}{2}}}{2\alpha_{i+\frac{1}{2}}} \gamma_{i+\frac{1}{2}}^\pm + 1 \quad (\text{B.10})$$

$$\hat{\beta}_{i+\frac{1}{2}}^\pm = 1 - \gamma_{i+\frac{1}{2}}^\pm \quad (\text{B.11})$$

以下 $\gamma_{i+\frac{1}{2}}^+$ 及 $\gamma_{i+\frac{1}{2}}^-$ 的計算可以有一次方項、二次方項、四次方項三種不同的運用，一次方項的我們稱之為 HA1，二次方項為 HA，四次方項為 HA4。不同運用的定差格式分述如下：

1. HA1

$$\begin{aligned} \gamma_{i+\frac{1}{2}}^+ &= \frac{(\psi_{i-1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i+1}^n)^2}{(\psi_{i-1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i+1}^n)^2 + \psi_i^n \psi_{i+1}^n + \varepsilon} \\ \gamma_{i+\frac{1}{2}}^- &= \frac{(\psi_i^n - 2\psi_{i+1}^n + \psi_{i+2}^n)^2}{(\psi_i^n - 2\psi_{i+1}^n + \psi_{i+2}^n)^2 + \psi_i^n \psi_{i+1}^n + \varepsilon} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

2. HA

$$\begin{aligned} \gamma_{i+\frac{1}{2}}^+ &= \left[\frac{(\psi_{i-1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i+1}^n)^2}{(\psi_{i-1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i+1}^n)^2 + \psi_i^n \psi_{i+1}^n + \varepsilon} \right]^2 \\ \gamma_{i+\frac{1}{2}}^- &= \left[\frac{(\psi_i^n - 2\psi_{i+1}^n + \psi_{i+2}^n)^2}{(\psi_i^n - 2\psi_{i+1}^n + \psi_{i+2}^n)^2 + \psi_i^n \psi_{i+1}^n + \varepsilon} \right]^2 \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

3. HA4

$$\begin{aligned} \gamma_{i+\frac{1}{2}}^+ &= \left[\frac{(\psi_{i-1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i+1}^n)^2}{(\psi_{i-1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i+1}^n)^2 + \psi_i^n \psi_{i+1}^n + \varepsilon} \right]^4 \\ \gamma_{i+\frac{1}{2}}^- &= \left[\frac{(\psi_i^n - 2\psi_{i+1}^n + \psi_{i+2}^n)^2}{(\psi_i^n - 2\psi_{i+1}^n + \psi_{i+2}^n)^2 + \psi_i^n \psi_{i+1}^n + \varepsilon} \right]^4 \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$\hat{u}_{i+\frac{1}{2}}^+ = (u_{i+\frac{1}{2}}^+ u_{i-\frac{1}{2}}^+)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.15})$$

$$\hat{u}_{i+\frac{1}{2}}^- = -(|u_{i+\frac{1}{2}}^-| |u_{i+\frac{3}{2}}^-|)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.16})$$

這裡上標 n 指積分過程中第 n 個時階，且 $\varepsilon = 10^{-15}$

誌 謝

研究過程中，感謝 R. T. Williams 教授提供寶貴的意見。本文在國家科學委員會專案計劃 NSC82 - 0202 - M - 002 - 073 支援下完成。也謝謝徐月娟博士指出 Hsu 和 Arakawa (1990) 的變化方式。十分感謝論文審查者的寶貴意見及文字更正。

縮寫代號說明

- FCT: flux-corrected transport。
- FD2: 二階時間空間中差分法。
- FD4: 四階空間二階時間中差分法。
- HA: Hsu-Arakawa 法 (γ 為平方項)。
- HA1: Hsu-Arakawa 法 (γ 調整為一次方項)。
- HA4: Hsu-Arakawa 法 (γ 調整為四次方項)。
- SM: Smolarkiewicz 法。
- SML: Smolarkiewicz 二 (低) 階法 (SM low order)。
- SMH: Smolarkiewicz 三 (高) 階法 (SM high order)。
- SMM: Smolarkiewicz 混合階法 (SM mixed order)。
- SML1: Smolarkiewicz 二階法經一次校正 (SML one corrective step)。
- SML2: Smolarkiewicz 二階法經二次校正 (SML two corrective steps)。
- SML3: Smolarkiewicz 二階法經三次校正 (SML three corrective steps)。
- SMH1: Smolarkiewicz 三階法經一次校正 (SMH one corrective step)。
- SMH2: Smolarkiewicz 三階法經二次校正 (SMH two corrective steps)。
- SMH3: Smolarkiewicz 三階法經三次校正 (SMH three corrective steps)。
- SMH4: Smolarkiewicz 三階法經四次校正 (SMH four corrective steps)。
- SMM1: Smolarkiewicz 混合階法經一次校正 (SMM one corrective step)。
- SMM2: Smolarkiewicz 混合階法經二次校正 (SMM two corrective steps)。
- SMM3: Smolarkiewicz 混合階法經三次校正 (SMM three corrective steps)。
- SMM4: Smolarkiewicz 混合階法經四次校正 (SMM four corrective steps)。

參考文獻：

- Book, D. L., J. P. Boris and K. Hain, 1975: Flux - corrected transport. II: Generalizations of the method. *J. Comput. Phys.*, **18**, 248-283.
- Boris, J. P., and D. L. Book, 1973: Flux- transport. I: SHASTA, a fluid transport a algorithm that works. *J. Comput. Phys.*, **11**, 38-69.

- Boris, J. P., 1976: Flux - corrected transport. III: Minimal - error FCT algorithms. *J. Comput. Phys.*, **20**, 397-431.
- Clark, T. L., 1979: Numerical simulations with a three-dimensional cloud model: Lateral boundary condition experiments and multicellular severe storm simulations. *J. Atmos. Sci.*, **36**, 2191-2215.
- Clark, T. L., and W. D. Hall, 1979: A numerical experiment on stochastic condensation theory. *J. Atmos. Sci.*, **36**, 470-483.
- Crowley, W. P., 1968: Numerical advection experiments. *Mon. Wea. Rev.*, **96**, 1-11.
- Harten, A., 1978: The artificial compression method for computation of shocks and contact discontinuities. III: Self-adjusting hybrid schemes. *J. Comput. Phys.*, **32**, 363-389.
- Harten, A., and G. Zwas, 1972: Self-adjusted hybrid schemes for shock computations. *J. Comput. Phys.*, **6**, 568-583.
- Hsu, Y.-J., and A. Arakawa, 1990: Numerical modeling of the atmosphere with an isentropic vertical coordinate. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 1933-1959.
- Rood, R. B., 1987: Numerical advection algorithms and their role in atmospheric transport and chemistry models. *Rev. of Geophys.*, **25**, 71-100.
- Smolarkiewicz, P. K., 1982: The multidimensional Crowley advection scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **110**, 1968-1983.
- Smolarkiewicz, P.K., 1983: A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 479-486.
- Smolarkiewicz, P.K., 1984: A fully multidimensional positive definite advection transport algorithm with small implicit diffusion. *J. Comput. Phys.*, **54**, 325-362.
- Smolarkiewicz, P.K., and T. L. Clark, 1986: The multidimensional positive definite advection transport algorithm: further development and applications. *J. Comput. Phys.*, **67**, 396-438.
- Takacs, L. L., 1985: A two-step scheme for the advection equation with minimized dissipation and dispersion errors. *Mon. Wea. Rev.*, **113**, 1050-1065.
- 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.
- Zalesak, S. T., 1979: Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *J. Comput. Phys.*, **31**, 335-362.
- 郭鴻基, 柳再明, 周仲島, 1990: 平流傳輸方程的計算: 交錯網格之有限差分法. *大氣科學*, **18**, 159-169.

A Study of Positive Definite Schemes

Hung-chi Kuo and Tzay-Ming Leou

Department of Atmospheric Science
National Taiwan University

Computer Center
Central Weather Bureau

ABSTRACT

In this paper we give a detail comparative studies of two recent positive definite methods of Smolarkiewicz (1983, 1984) and Hsu and Arakawa (1990). We have tested the schemes with one dimensional linear advection. The Gaussian, Gaussian pus constant, sine and square waves are used as initial conditions. The convergent rate, stability, accuracy, maintenance of peak value, efficiency and the implementation of the methods are discussed. A new mixed order of Smolarkiewicz method is proposed. The mixed order scheme yields the same result as the high order of Smolarkiewicz scheme.

Our computations indicate that no more than three corrective steps should be used in the mixed order and the high order of Smolarkiewicz schemes. Maximum of two corrective steps should be used in the low order scheme of Smolarkiewicz. The high order scheme in the third corrective steps have the best peak value (almost 100% after 320 time steps). The high order scheme in the second corrective steps have 93% of the original peak value. The low order Smolarkiewicz in second corrective schemes have 80% and the Hsu-Arakawa scheme both have 86.5% of the original peak value. The low order scheme have upstream phase shift. The high, mixed order of Smolarkiewicz schemes and Hsu-Arakawa scheme do not have phase shift. The central fourth, second order finite differencing and upstream scheme are included for the comparison.

Key Words: advection equation, positive definite scheme, anti-diffusion