

# 半拉格朗日法的數值實驗

曾忠一<sup>1 2</sup> 郭廷新<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 中央研究院物理研究所

<sup>2</sup> 國立台灣大學大氣科學系

(中華民國八十三年四月十三日收稿；中華民國八十四年二月十五日定稿)

## 摘 要

本研究進行半拉格朗日法的數值實驗，在一維的實驗中我們比較二位面和三位面格式以及各種內插格式之間的差異，測試結果發現四種二位面格式中有三種內插格式優於三位面格式。二維的實驗比Rancic and Sindjic (1989) (以下簡稱RS)的結果更接近解析解的最大值1，總誤差、頻散誤差和耗散誤差也都比RS的結果小，這說明了RS所使用的半拉格朗日格式不但不是非內插的格式，也不是具有最小耗散、最小頻散誤差的格式。

關鍵詞：半拉格朗日法、非線性平流方程

## 一、前 言

在從事大氣現象的數值模擬時，可能由於考慮較複雜的物理機制、動力過程和邊界條件而增加對電腦計算速度和記憶空間的需求量，也可能為了增進模式的效率而要求加大預報的時間步長(time step)，這些對傳統的數值方法而言是很難達成的。如果能夠設計一種快速且準確的數值格式，那麼將可提高數值模式的解析度並增加模式的效率。Robert (1969)所提出的半隱式格式是一種無條件穩定的數值格式，可以增大預報的時間步長，在固定的預報時間中使用較少的時間積分次數。而Robert (1981)年所提出的半拉格朗日法是一種以拉格朗日描述法為基礎的時間離散化法，這種離散化法在時間步長大時仍可得到準確的預報結果。半隱式半拉格朗日法發展出來以後，一般都給予相當高的評價，如Robert (1982), Robert *et al.* (1985), Temperton and Staniforth (1987)和Tanguay *et al.* (1990)，但是這種數值方法在格式上有很多的歧異性存在，可以是內插或非內插格式，可以是二位面(level)或三位面格式，而用來做定點疊代(fixed point iteration)和內插的格式也有好幾種，在應用上也可和波譜法或有限元法搭配，因此在使用上必須予以分辨，以免造成混淆。

本研究是將半隱式半拉格朗日法應用到雲模式的一個先前實驗。由於半隱式半拉格朗日法是無條件穩定的，而且相位誤差非常小，如此便可通過半隱式半拉格朗日法這種優異的表現來處理容許聲波傳播的彈性系統，而時間步長的選取不必因聲波的大相位速度而有所限制，只需要考慮準確度的因素。曾(1993)對各種數值方法做了有系統的介紹，對於半隱式格式以及半拉格朗日法都有透徹的陳述，相關的詳細說明可參考該書。

本文第二節是一維的數值實驗，測試方法是對無黏性的 Burgers 方程進行積分，比較二位面格式和三位面格式之間的差異，共測試了四種外延的方法。第三節是二維的數值實驗，首先談到二維半拉格朗日法的一些基本問題，如定點疊代、邊界條件的處理和內插公式等。至於二維的測試是用無輻散的旋轉流場來平流一個角錐，讓它旋轉兩圈後來看其相位、頻散誤差、耗散誤差和總誤差，用得到的結果和 Rancic and Sindjic (1989) 的結果比較。第四節是結論和建議。

## 二、一維的數值實驗：無黏性 Burgers 方程 (即非線性平流方程)

一維的測試所使用的方程是無黏性 Burgers 方程

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

這個方程在積分的過程中會有激波 (shock) 形成，這個現象對傳統的數值方法而言是一項很大的挑戰。Kuo and Williams (1990) 的研究就是針對這個問題做測試，證明半拉格朗日法在積分 Burgers 方程的過程中有良好的表現，誤差主要局限於形成激波的兩個網格間距之間。近年來由於準確求取二位面格式出發點的方法陸續被發展出來，例如 Bates and McDonald (1987) 就用時間位面  $n$  和  $n-1$  上的速度來外延時間位面  $n+1/2$  上的平流速度，以疊代法來求得位移點的位置。另外，Temperton and Staniforth (1987) 更進一步測試了四種不同計算出發點的方法。以下的測試就是繼續 Kuo and Williams 的研究，將三位面格式改成二位面格式來比較這兩種格式的差異。

無黏性 Burgers 方程的通解是

$$u(x, t) = f(x - u(x, t)) \quad (2)$$

若給定初始條件為

$$u(x, 0) = f(x) = \bar{u} - \tan^{-1}(x - x_0) \quad (3)$$

則解析解為

$$u = \bar{u} - \tan^{-1}(x - ut - x_0) \quad (4)$$

在本文中已令  $x_0 = 0$ ， $\bar{u} = 0$ 。依 Kuo and Williams (1990) 的推導，激波形成的時間是在  $t=1$  秒時。Burgers 方程在不同時間的解析解如圖 1 所示，特別注意到  $t=1$  秒時  $u$  的空間變化很大，這就是激波形成的情況。

(1) 式可寫成全導數的形式：

$$\frac{du}{dt} = 0 \quad (5)$$

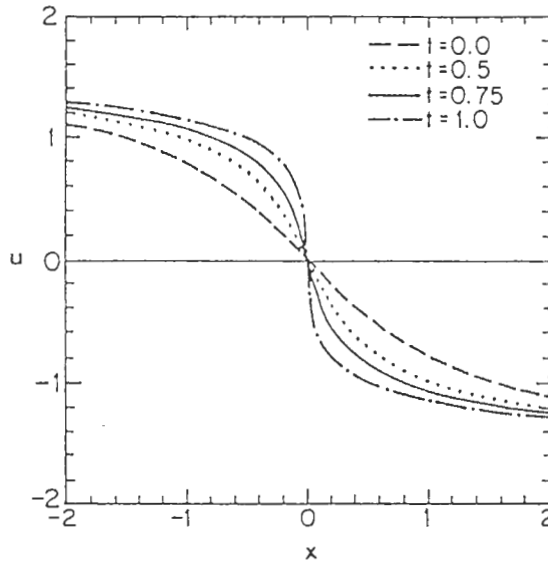


圖1 無黏性Burgers 方程在不同時間的解析解(取自 Kuo and Williams, 1990)。

假設在時間位面  $n$  上，所有網格點上的  $u$  值都為已知，我們希望能求出時間位面  $n+1$  上所有網格點的  $u$  值，則依半拉格朗日法的精神，若用二位面格式，則(5)式可以離散化為

$$\frac{u_j^{n+1} - u_Q}{\Delta t} = 0 \quad (6)$$

其中  $u_Q$  表示出發點的  $u$  值。(6)式可改寫為

$$u(x_j, t + \Delta t) = u(x_j - \alpha_j, t) \quad (7)$$

其中  $\alpha_j$  是位移，為出發點  $Q$  和到達點  $(j, n+1)$  的距離，可由下式積分求得：

$$dx/dt = u \quad (8)$$

用時間位面  $n+1/2$  上(即位移中點)的速度  $u$  來近似平均速度，則位移可以寫成

$$\alpha_j = u(x_j - \alpha_j/2, t + \Delta t/2)\Delta t \quad (9)$$

其中  $\alpha_j$  和  $u$  均為變數，位移可用定點疊代法求出來，疊代的式子為

$$\alpha_j^{(n+1)} = u(x_j - \alpha_j^{(n)}/2, t + \Delta t/2)\Delta t \quad (10)$$

(9)式中所使用的平流速度是在時間位面  $n+1/2$  上，對二位面格式來說，這是未知數，故必須做時間外延來近似。有四種方法(Temperton and Staniforth, 1987)可以求得其近似值，將在下面說明。(5)式也可離散化成三位面的情況，圖2是使用 Kuo and Williams (1990)的程式所得到的有關三位面格式的結果，將用來和本文的二位面格式比較。有關上述半拉格朗日法更詳細的推導可參考曾(1993)的說明。

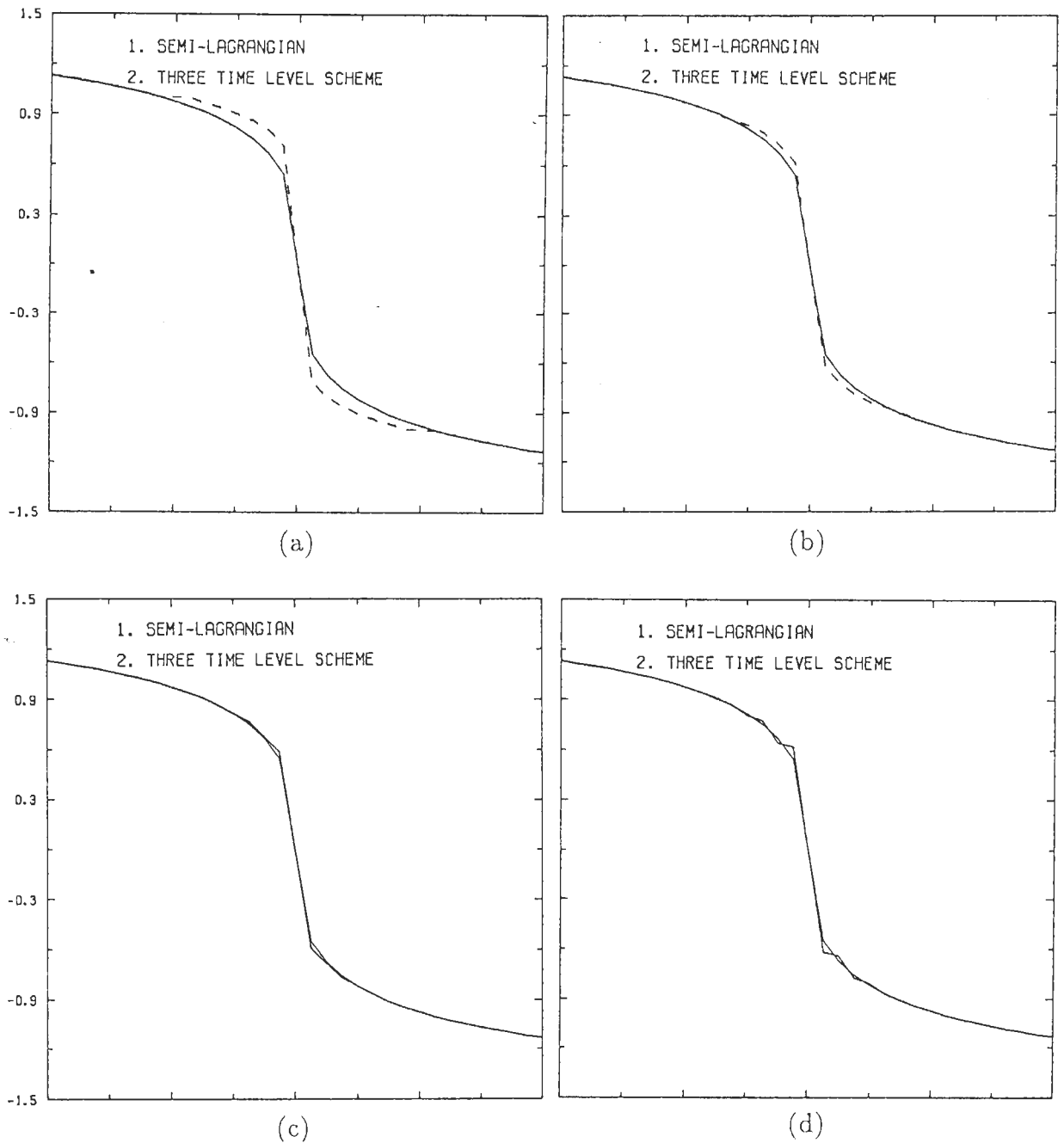


圖2 三位面格式在不同時間步長下數值解(虛線)和解析解(實線)的合成圖，縱坐標為 $u$ ，橫坐標為 $x$ 。(a) 0.5秒(b) 0.125秒(c) 0.03125秒(d) 0.0078125秒。

### (一) 第一種方法

用時間位面  $n$  上的速度來近似時間位面  $n + 1/2$  上的速度，即

$$u_j^{n+1/2} = u_j^n \quad (11)$$

由測試結果我們發現，這個方法在時間步長大的時候表現最差，原因是這個方法的截斷誤差是  $O(\Delta)$ ， $\Delta$  為  $\Delta x$  或  $\Delta t$ ，視  $\Delta x$  和  $\Delta t$  的大小而定 (McDonald, 1986)，當時間步長縮小時，則表現和其他方法相近，但是在時間步長太小時，一方面沒有效率，一方面也較不準確，如圖 3 所示。

### (二) 第二種方法

用時間位面  $n$  和  $n - 1$  上的速度來外延得到時間位面  $n + 1/2$  上的速度，即用下式進行線性外延：

$$u_j^{n+1/2} = \frac{1}{2}(3u_j^n - u_j^{n-1}) \quad (12)$$

然後用內插公式決定出網格點之間的  $u$  值，再使用疊代法求出位移  $\alpha_j$ 。

由圖 4 可看出數值解相當準確，在時間步長大時表現也相當良好。但是我們可以觀察到當  $\Delta t = 0.5$  秒時誤差比較大，如圖 4a 所示，這是可以理解的，因為激波形成的時間是 1 秒鐘，在二位面格式中是使用前兩個或三個時間位面上的  $u$  值來外延  $u_j^{n+1/2}$ ，因此當時間步長為 0.5 秒時，由於第二次預報就有激波形成，所以計算位移的誤差會比較大。另一方面，我們發現時間步長太小時有一些小的振盪發生，如圖 4c, d 所示，不過仍然非常準確。

### (三) 第三種方法

使用  $n$ ,  $n - 1$  和  $n - 2$  三個時間位面上的  $u$  值來做外延，外延的式子為

$$u_j^{n+1/2} = \frac{1}{8}(15u_j^n - 10u_j^{n-1} + 3u_j^{n-2}) \quad (13)$$

測試的結果比第二種方法更準確，在時間步長  $\Delta t = 0.125$  時，數值解和解析解幾乎完全重疊，如圖 5b 所示，而時間步長小時依然有些微的振盪出現，如圖 5c, d。

另外我們還測試了直接在路徑上做時間外延的方法，外延的式子為

$$\alpha = \frac{1}{2}\Delta t \left[ 3u^n(j\Delta x - \alpha) - u^{n-1}(j\Delta x - 2\alpha) \right] \quad (14)$$

測試的結果都和第三種方法非常相近，在時間步長大時非常準確，而時間步長小時則有些微的振盪出現。

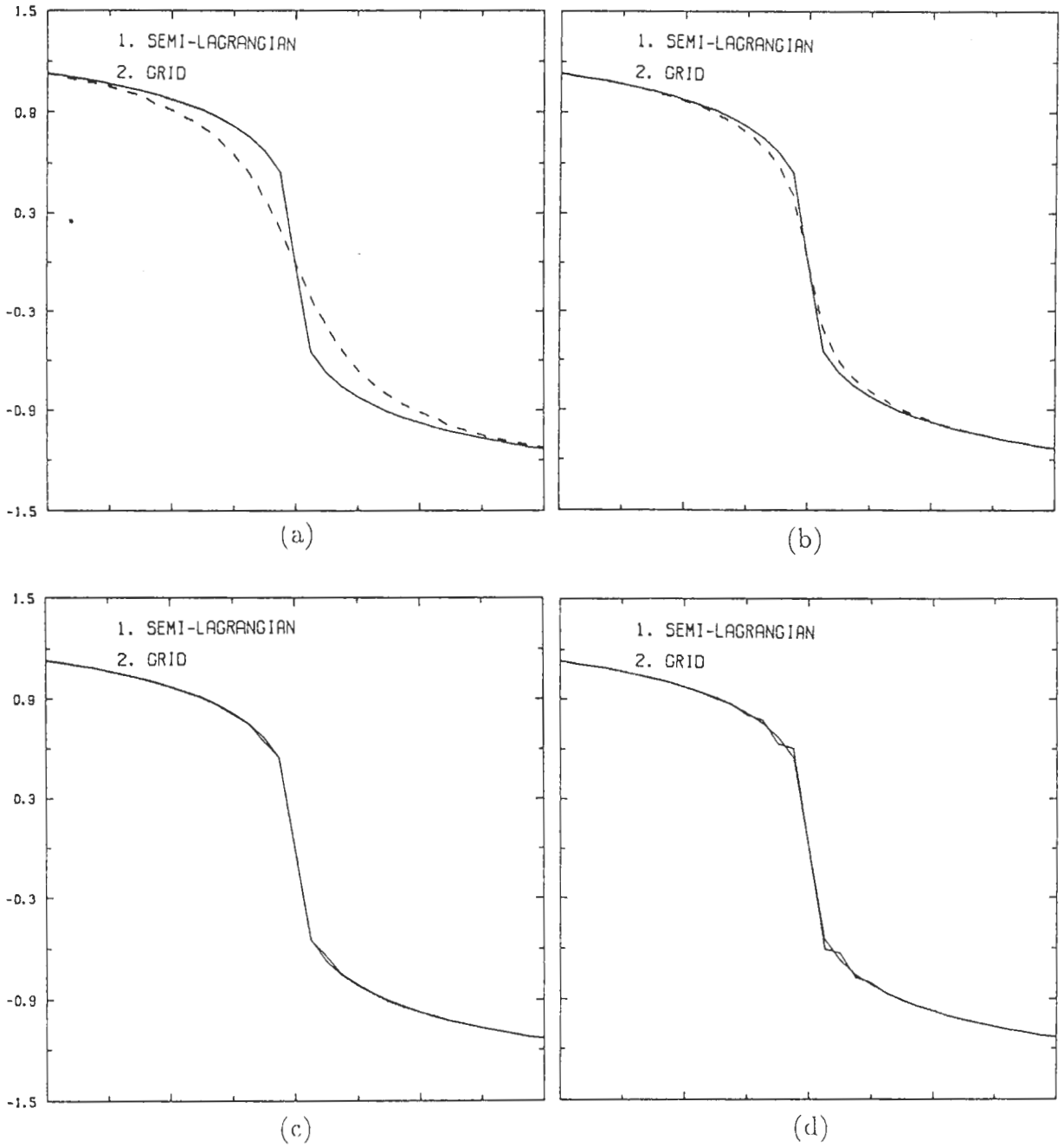


圖3 同圖2，但為二位面格式，使用第一種外延法。

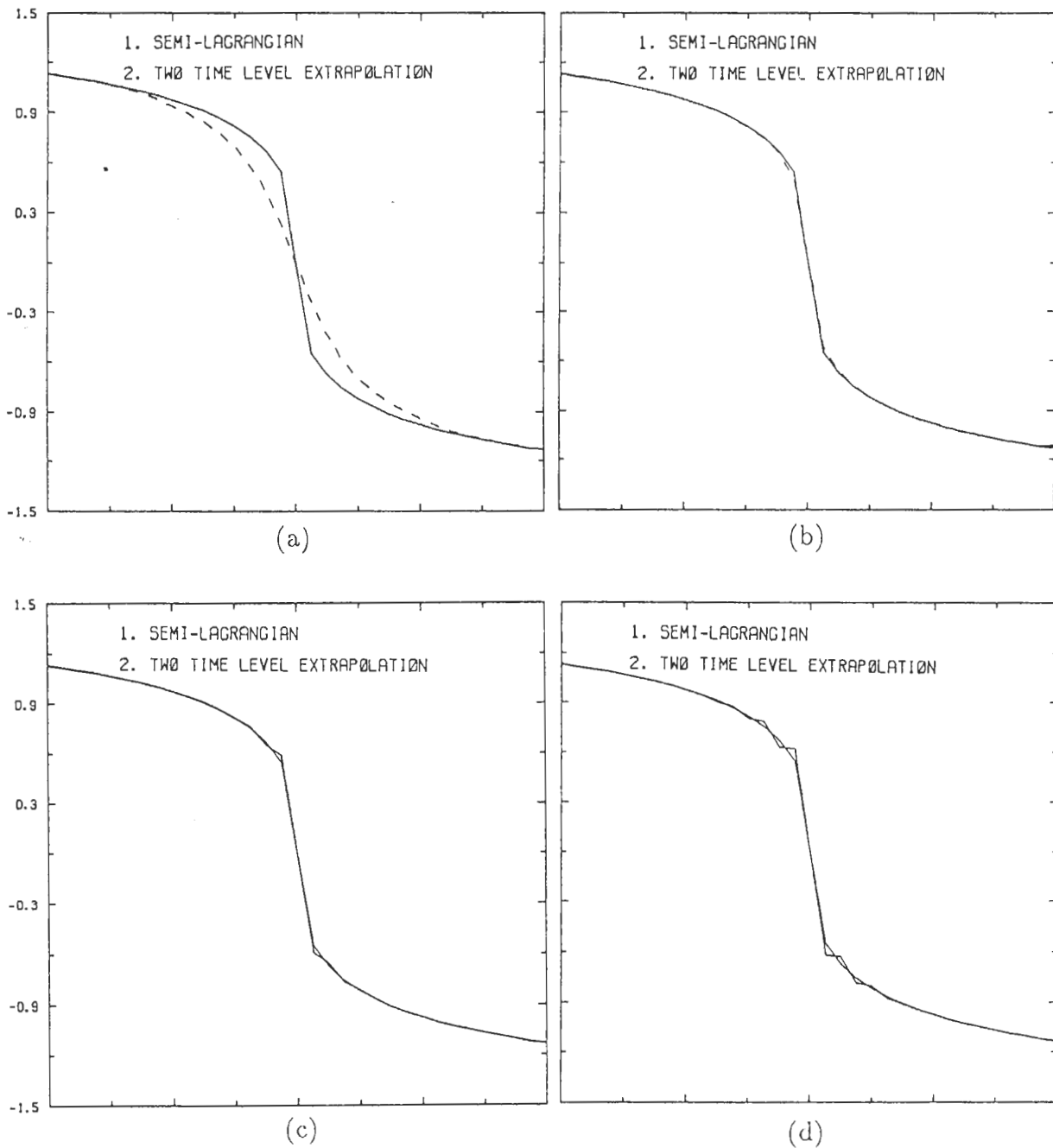


圖4 同圖2，但為二位面格式，使用第二種外延法。

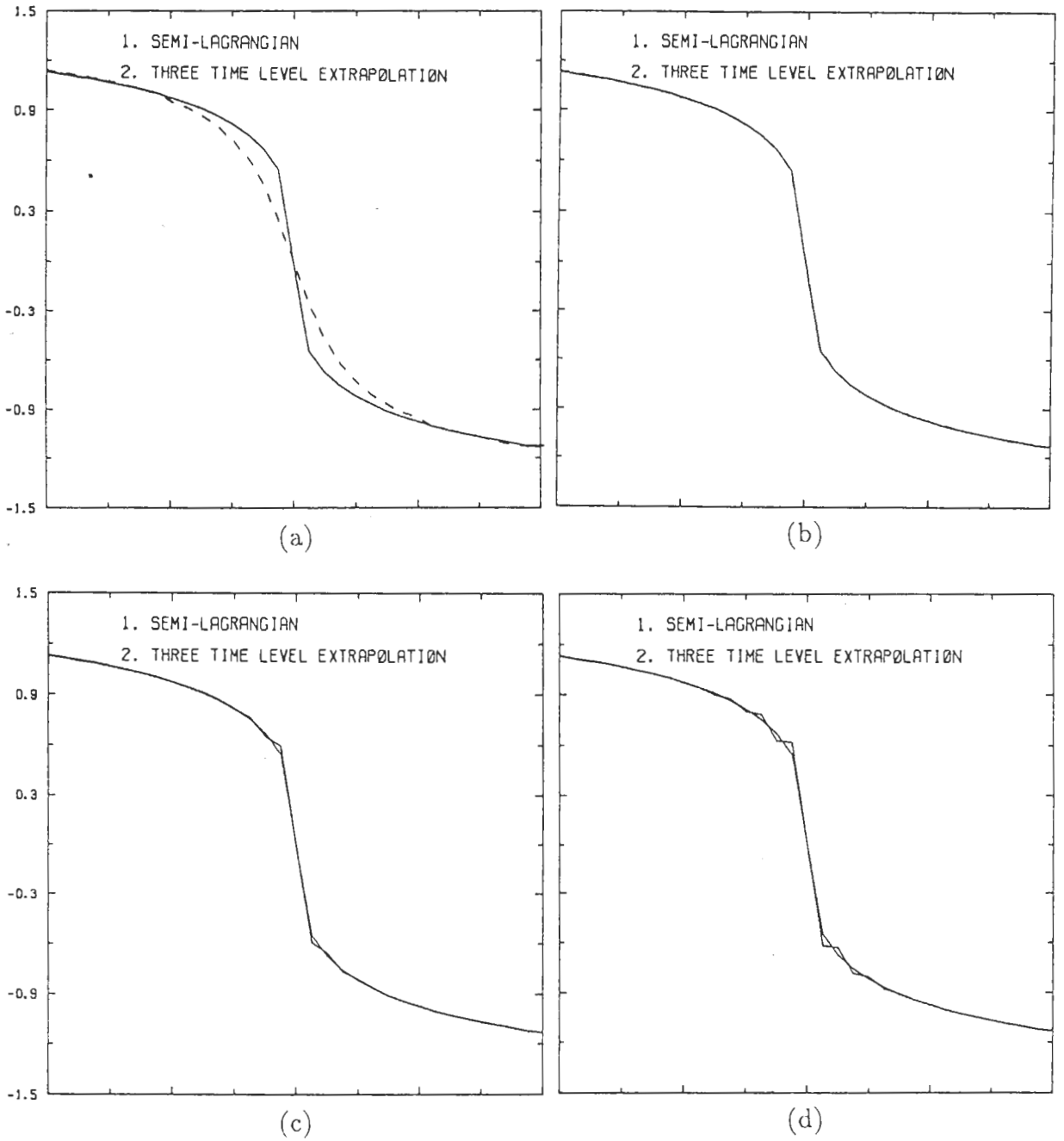


圖5 同圖2，但為二位面格式，使用第三種外延法。



### 三、二維半拉格朗日法

有鑑於一維的測試中，二位面格式比三位面格式準確，所以二維的數值測試將採用二位面的半拉格朗日法，並且選用其中的第二種外延法。二維半拉格朗日法的原理與觀念與一維的情況大同小異，只是在處理上比一維稍微複雜。本節先就二維半拉格朗日法的定點疊代、邊界條件的處理和內插公式加以介紹。最後進行二維的測試。

#### (一) 二維的定點疊代

半拉格朗日法最重要的工作是準確地求得出發點的位置，我們已經在一維的測試中強調過了，將位移分為 $x$ 和 $y$ 方向，分別為 $\alpha$ 和 $\beta$ ，若到達點(網格點上)的坐標為 $(i, j)$ ，則

$$\alpha = x_{i,j} - x_Q \quad (15)$$

$$\beta = y_{i,j} - y_Q \quad (16)$$

其中 $Q$ 代表出發點的位置。為了準確地預報，必須正確地找出位移 $\alpha$ 和 $\beta$ ，如此才能確定出發點的位置，然後內插求得網格點之間的變數值。關於位移的求法是使用所謂的定點疊代法求得，疊代的式子為

$$\alpha^{(n+1)} = u(x - \alpha^{(n)}/2, y - \beta^{(n)}/2, t + \Delta t/2)\Delta t \quad (17)$$

$$\beta^{(n+1)} = v(x - \alpha^{(n)}/2, y - \beta^{(n)}/2, t + \Delta t/2)\Delta t \quad (18)$$

要特別提出的一點是，定點疊代收斂的速度相當的快，通常只需疊代數次就可達到足夠的準確度。

#### (二) 半拉格朗日法邊界條件的處理

上小節中，使用疊代法求得出發點的位置時，在大部份的情況下出發點 $Q$ 會落在求解域之中，但是有些情況出發點會跑出求解域之外，Robert (1981)的論文中已經探討過這個問題。當出發點位於求解域之外時，則使用路徑和邊界的交點來估計出發點的變數值。在實際編寫程式時，上述的情況可以變換為求解兩個線性代數方程組。在一個矩形的求解域中任何一條經過網格點的直線和邊界有兩個交點，利用“位移的方向性”和“邊界是位於出發點和到達點之間”兩個條件便可以判斷出發點流入的邊界，如圖6所示。圖中 $Q$ 為出發點， $P$ 為到達點， $\alpha$ 為 $x$ 方向的位移， $\beta$ 為 $y$ 方向的位移，而 $B$ 就是流入點。

#### (三) 內插公式

在Robert (1981)的論文中已經詳細地探討到半拉格朗日法實際應用時所可能遭遇的困難及其可能的解決方法。上兩小節中所談的問題其實是密不可分的，在使用定點疊代法求取位移時，若出發點是位於求解域之外，則找出流入的邊界，再使用線性內插公式求取變數值，其他一般的情況，則使用四級準確的內插公式，先在一個方向進行內插，再做另一個方向。

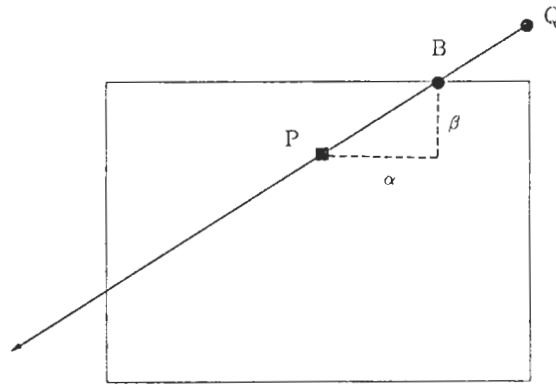


圖6 二維半拉格朗日法決定流入點的示意圖。

#### (四) 二維的數值實驗：無輻散的旋轉流場

半拉格朗日法由一維發展至二維在技術上有幾點要突破，如同上小節所描述的，二維半拉格朗日法出發點的求取仍歸結為一個定點疊代的問題。如果出發點位於求解域之內，則必須有一個適當的內插公式來求出網格點之間的變數值；如果出發點落在求解域之外，則經由求解代數方程組找出流入點，然後內插求出變數值。在本節中所要測試的問題是取自 Rancic and Sindjic (1989)(本文中簡稱為RS)所提出“非內插半拉格朗日平流格式”的研究，雖然他們的方法其實仍舊是一種內插的半拉格朗日法，但是由於他們所做的二維測試相當的簡明，是用純旋轉的風場來平流一個初始擾動，可以說是一維線性平流方程最直接的推演，最適合用來測試半拉格朗日程式結構的正確性。現在將測試的內容簡述如下：

- 積分範圍：300km × 300km
- 網格間距： $\Delta x = \Delta y = 10\text{km}$
- 旋轉風場： $u = (y - y_c)\Omega$ ,  $v = -(x - x_c)\Omega$ ，其中 $(x_c, y_c)$ 是旋轉中心的坐標，定為(15, 15)， $\Omega$ 是角速度，其大小為 $3.14 \times 10^{-4} \text{sec}^{-1}$ ，注意到風場只是空間的線性函數並不隨時間變化。
- 初始擾動：擾動是一個半徑為6個網格間距的角錐，中心位於 $i = 15$ ， $j = 9$ ，高度是1單位。測試的方法是用純旋轉無輻散的風場來平流這個角錐，讓它旋轉兩圈，也就是在40000秒之後來看此時的擾動變成什麼情況。這個測試在看旋轉兩圈之後相位是否準確以及角錐耗散的程度。
- 時間步長：分為250，500和1000秒三種情況。

測試結果如圖7所示，可以看出，三種不同時間步長的測試，40000秒後數值解的相位均非常準確。重要的是可以發現，時間步長越大，則數值解的最大值越接近解析解1。為了更進一步和RS的結果比較，下面採用Takacs (1985)的方法計算出數值解和解析解的差，計算的量有總誤差、頻散誤差和耗散誤差，計算公式為

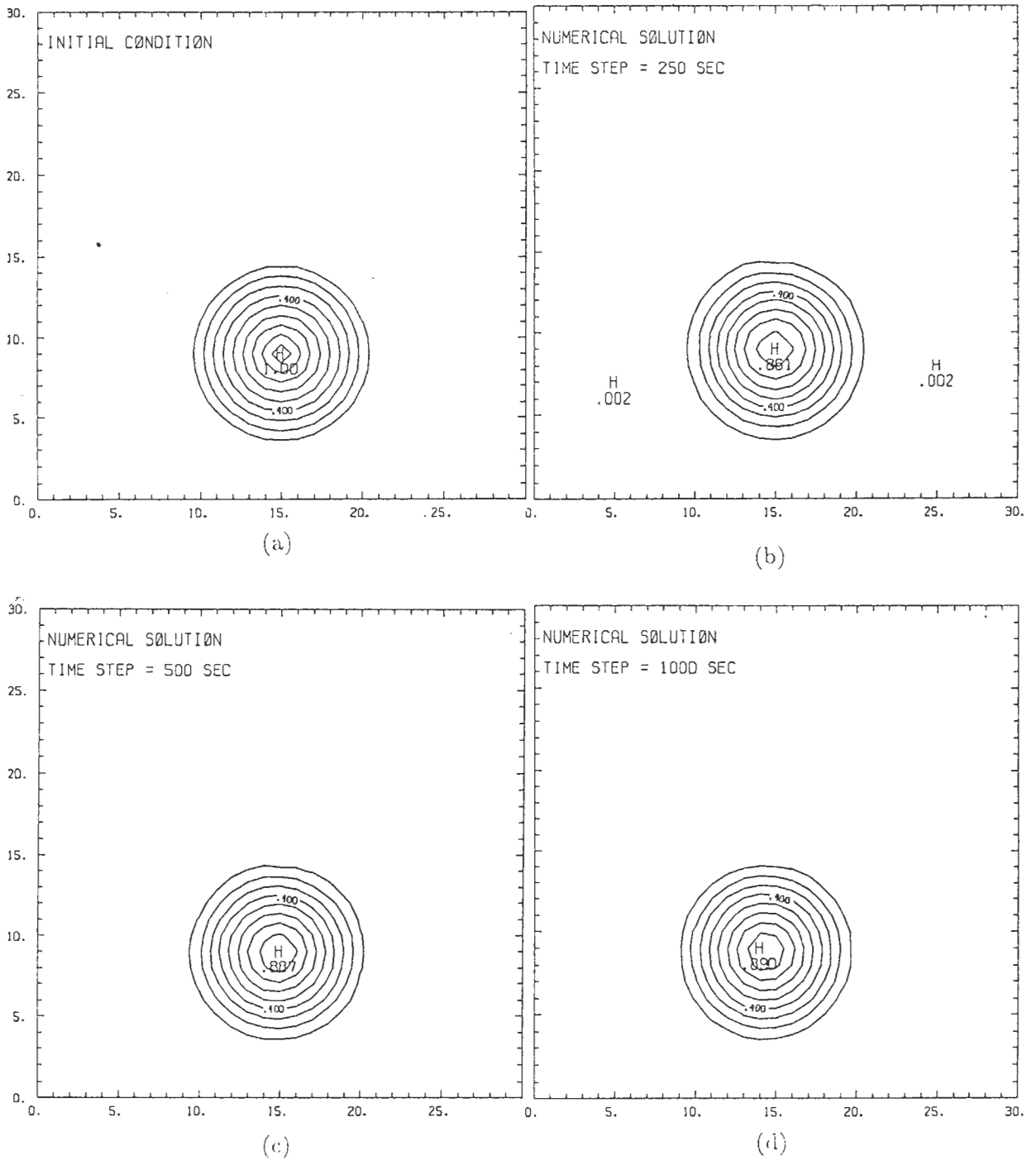


圖7 二維數值測試40000秒後的結果，縱坐標為y軸，縱坐標為x軸。(a)解析解(b)時間步長250秒(c)時間步長500秒(d)時間步長1000秒。

$$E_{TOT} = \frac{1}{M} \sum (\psi_T - \psi_N)^2 \quad (19)$$

$$E_{DISS} = \left[ \sigma(\psi_T) - \sigma(\psi_N) \right]^2 + (\overline{\psi_T} - \overline{\psi_N})^2 \quad (20)$$

$$E_{DISP} = 2(1 - \rho)\sigma(\psi_T)\sigma(\psi_N) \quad (21)$$

其中 $\psi$ 為某變數， $\psi_T$ 為真解， $\psi_N$ 為數值解， $M$ 為網格點總數， $\rho$ 為相關係數(correlation coefficient)， $\sigma$ 為標準偏差， $\Sigma$ 代表對所有網格點的變數做總和， $\overline{\psi}$ 代表變數對所有網格點平均。而 $E_{TOT}$ 、 $E_{DISS}$ 和 $E_{DISP}$ 分別為總誤差，耗散誤差和頻散誤差，並且 $E_{TOT} = E_{DISS} + E_{DISP}$ 。擾動繞行兩圈之後的最大值、最小值和三個誤差如表1所示。

由表一可以看出，在所有的情況下數值解的最大值均比RS更接近解析解的最大值1，頻散誤差也都比RS小，而總誤差和耗散誤差在 $\Delta t = 250$ 和 $\Delta t = 500$ 秒的情況比RS小。另一個非常重要的特徵是數值解的最大值隨時間步長的增加而更接近1，這是一個非常好的特性。由以上的比較可得到一個結論，RS的半拉格朗日平流格式非但不是非內插的格式，也不是具有最小耗散或最小頻散誤差的格式，並且最大值耗散得比較快。另外，我們也做了時間步長為2000秒和2500秒的測試，但是得到的結果比較不好。雖然耗散仍然不大，但是由於所使用的邊界條件是求解域之外均為零，因而當時間步長太大時，出發點常會跑出求解域之外而影響到測試結果。雖然半拉格朗日法能夠準確地求出發點的位置，但是由於有限區域模式邊界條件不易準確地處理，故時間步長的選取仍不宜過大。這說明了雖然半隱式半拉格朗日法是無條件穩定的，但基於準確度的考量，時間步長依舊有其限制。

表一 本文二維數值實驗和RS得到的總誤差、耗散誤差和頻散誤差。表中也列出了數值解的最大值和最小值。每個測試有三個不同的時間步長，分別為250，500和1000秒。

圈數	時間步長	總誤差	耗散誤差	頻散誤差	最大值	最小值
一	250	8.3398E-5	1.6993E-6	8.1699E-5	0.8607	-0.0186
	500	9.5869E-5	2.1770E-6	9.3691E-5	0.8870	-0.0151
	1000	7.7597E-4	1.4535E-5	7.6143E-4	0.8902	-0.0129
二	250	1.1203E-4	4.4685E-6	1.0756E-4	0.8476	-0.0179
	500	1.6566E-4	3.4043E-6	1.6225E-4	0.8652	-0.0154
	1000	1.5080E-3	1.6221E-5	1.4917E-3	0.8810	-0.0142
RS	250	4.99E-4	1.18E-4	3.18E-4	0.7320	-0.0160
	500	2.07E-4	0.35E-4	1.72E-4	0.8030	-0.0120
	1000	2.65E-4	0.12E-4	2.53E-4	0.8230	-0.0110

由上面的分析可知，半拉格朗日法其實仍然有很多不同的形式，可以是二位面或三位面格式，可以是內插或非內插格式。如果是內插的格式，則又可以有各種準確度不一的內插公式，用來做內插的點也有不同的選法。由於格式之間有這麼多的歧異性存在，自然所得到的結果會有一些不同。在這個二維測試中我們所使用的是二位面的格式，內插法是四級準確的公式，而RS所使用的是三位面的格式，內插法是使用Takacs (1985)的方法。雖然RS的結果比傳統的尤拉法準確，但是和本文的結果比較則誤差較大，故RS的半拉格朗日格式只是普通的內插格式，並不能稱為非內插的格式，也不是具有最小耗散、最小頻散誤差的格式。

#### 四、結論與建議

由以上一維和二維的測試可以歸納出下面幾點結論：

- (a) 一維的測試表明，半拉格朗日法優於傳統的尤拉法，而二位面格式又優於三位面格式，在收斂判據的限制下時間步長增大有助於準確度的增加，這是一個相當好的性質。
- (b) 綜合以上測試的結果，可以歸納出二位面格式有下面的優點：
  - 程式的編寫比較容易。
  - 對計算機記憶容量的需求較小。
  - 沒有計算模 (computational mode)。
  - 效率是三位面格式的兩倍。
  - 不需要做時間過濾 (time filtering)。

除了第一種方法外，其餘的二位面格式在時間步長大時都比三位面格式準確，誤差非常小。另外，三位面格式在正值的部份會有正誤差，負值的部份會有負誤差，二位面格式正好相反。當時間步長縮小時，則表現差不多，但是由圖形比較可以發現，若時間步長太小，一方面沒有效率，一方面也較不準確，這說明了一個重要的事實，即半拉格朗日法在收斂判據的限制下，時間步長增加有助於準確度的增加。

- (c) 二維的測試表明，半拉格朗日法的相位、耗散和頻散誤差很小，本研究的結果否定了RS的結論，因為我們的結果顯示角錐的最大值比RS更接近1，誤差也比較小，這些優點都是引進二位面格式的結果。
- (d) 本研究的成果已應用於一個二維平板對稱的雲模式，明顯地增加了模擬的效率和模式的解析度，這篇論文將刊登在別處。

#### 誌謝

本文研究期間承蒙郭鴻基教授提供一維三位面格式的程式，並時常給予建議和支援，本論文才得以順利完成。郭淑真小姐和王達銘先生在打字和校稿上幫忙許多，並提供不少建議，在此一併致謝。本研究是在國科會專題研究計劃支持下完成的，專題計劃編號為NSC80-0202-M001-19。

## 參考文獻

- 曾忠一，1993：大氣模式的數值方法。渤海堂，台灣台北，695頁。
- Bates, J. R., and A. McDonald, 1987 : Improving the estimate of the departure point position in a two-time-level semi-Lagrangian and semi-implicit model. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 737-739.
- Kuo, H.-C., and R. T. Williams, 1990 : Semi-Lagrangian solutions to the inviscid Burgers equation. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 1278-1288.
- McDonald, A., 1986 : A semi-Lagrangian and semi-implicit two time-level integration scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **114**, 824-830.
- Rancic, M., and G. Sindjic, 1989 : Noninterpolating semi-Lagrangian advection scheme with minimized dissipation and dispersion errors. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 1906-1911.
- Robert, A. J., 1969 : The integration of a spectral model of the atmosphere by the implicit method. *Proc. WMO/IUGG Symp. on Numerical Weather Prediction*, Japan Meteorological Agency, Tokyo, pp. VII 19-VII 24.
- Robert, A., 1981 : A stable numerical integration scheme for the primitive meteorological equations. *Atmos.-Ocean*, **19**, 35-46.
- Robert, A. J., T. L. Yee, and H. Ritchie, 1985 : A semi-Lagrangian and semi-implicit numerical integration scheme for multi-level atmospheric models. *Mon. Wea. Rev.*, **113**, 388-394.
- Takacs, L. L., 1985 : A two-step scheme for the advection equation with minimized dissipation and dispersion errors. *Mon. Wea. Rev.*, **113**, 1050 - 1065.
- Tanguay, M., Robert, A., and Laprise, R., 1990 : A semi-implicit semi-Lagrangian fully compressible regional forecast model. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 1970-1980.
- Temperton, C., and A. Staniforth, 1987 : An efficient two-time-level semi-Lagrangian semi-implicit integration scheme. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **113**, 1025-1039.

## Numerical Experiments of Semi-Lagrangian Method

Chung-Yi Tseng <sup>1 2</sup>    Ting-Hsin Kuo <sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institute of Physics, Academia Sinica

<sup>2</sup> Department of Atmospheric Sciences  
National Taiwan University

### ABSTRACT

In this study, we investigate the semi-Lagrangian method by executing the following two experiments. In one-dimensional experiment, we study the numerical solution of the inviscid Burgers equation by semi-Lagrangian method. The differences between two-time-level and three-time-level scheme are compared. Test results show that three of the four tested two-time-level schemes are better than the three-time-level scheme used by Kuo and Williams (1990). In two-dimensional experiment, numerical results show less total, dispersion, and dissipation error in comparison with Rancic and Sindjic (1989). Maximum value of numerical solution is closer to analytical solution than Rancic and Sindjic (1989) in position. The preceding experiment indicates that the semi-Lagrangian scheme used in Rancic and Sindjic (1989) is neither a non-interpolating scheme nor a scheme with minimum dissipation and dispersion error.

Key words : Semi-Lagrangian method, Burgers equation.