

# 計算水汽平流之數值方法探討

劉其聖

美國海軍研究院

## 摘要

大氣中之水汽分佈常存有相當大之梯度，特別是於垂直方面。在計算水汽平流時，若數值方法處理不當，常會產生不合理之結果，例如負值之水汽。此類數值方法處理不當所生之問題。將因模式中對物理過程計算之精密化而更嚴重影響天氣預報結果。本文先舉一個水汽平流處理不當所生不良結果之實例，而後探討從現有文獻中水汽平流計算可選擇之數值方法，並討論各法之長處及缺點。

## 一、前言

水汽變化在天氣預報中扮演著非常重要之角色，推動大氣運動之熱力效應，均直接或間接的與水汽有關（如潛熱釋放，或雲及水汽對長短波輻射之影響）水汽預報之困難不僅因其所牽涉之相位變化（phase change）為開關式之非連續變化（如凝結或不凝結），或因其所經過之物理過程非常複雜且為非常小尺度之運動（如積雲）；更因水汽其三度空間分佈之梯度非常大（sharp gradient），除此而甚難做水汽場之分析外，在預報模式中對其平流之計算亦常有數值模擬上之困難。

數值方法計算水汽平流其主要問題常出在產生不合物理意義之負值水汽場，及無法維持水汽之強梯度分佈而將其變形、擴散。此些數值處理上所產生之問題將因模式中對物理過程處理之精密化而更加突顯。例如當使用積雲模式法去直接處理降水過程，或考慮雲與輻射間之交互作用，則模式中水汽平流計算所生之誤差將嚴重影響預報結果。本文即在探討如何選定適當之數值方法來計算水汽平流。

## 二、問題實例

在討論適當數值方法之前，先舉一個水汽平流處理不當所生之問題實例。圖 1 為美國海軍區域模式對某一網格點之 3 小時溫度、露點預報。由於該點在 400mb 及 500 mb 之間有甚強之下降氣流（ $\approx 10$  cm/s or  $10^{-2}$  mb/s），模式於 3 小時內 450 mb 處之水汽量幾乎完全抽光而至水汽混合比  $q \approx 2 \times 10^{-7}$  g/g。由於該層之大氣處於下降氣流之運動下，凝結現象不可能發生，故所有之水汽流失均為平流所致，然而若用 Lagrangian 之眼光以該處風速為  $\vec{v} \approx 30$  m/s， $w \approx 10^{-2}$  mb/s 來估計 3 小時內氣塊可能平流至該處之來源，則發覺氣塊必須存於 300 公里及 100 mb 之範圍內，其最遠可來至 300 公里外之 350 mb 層，而 350mb 層之水汽含量約為  $1 \times 10^{-4}$  g/g，顯然此甚乾之水汽， $q \approx 2 \times 10^{-7}$  g/g，為一不合理之結果。但若用模式中處理水汽平流之數值方法來估計水汽變化，則發覺此不合理之結果並非來自程式撰寫錯誤，而是來自數值方法之處理不當。

於模式中，我們用的是二階之通量定差法（

second order finit difference in flux form )，由於  $\sigma$  與  $q$  在垂直方向為 staggered 存放，故在 450 mb 處  $q$  由垂直平流所生之變化是由下列法計算：

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial q}{\partial t}\right)_{450} \approx \frac{\partial(\sigma q)}{\partial \sigma} \\ & = \frac{-1}{\Delta \sigma} [(\sigma q)_{475} - (\sigma q)_{425}] \\ & = \frac{-1}{\Delta \sigma} \left[ \sigma_{475} \left( \frac{q_{450} + q_{500}}{2} \right) - \sigma_{425} \left( \frac{q_{400} + q_{450}}{2} \right) \right] \\ & \approx \frac{-1}{\Delta p} \left[ w_{475} \left( \frac{q_{450} + q_{500}}{2} \right) - w_{425} \left( \frac{q_{400} + q_{450}}{2} \right) \right] \end{aligned}$$

由圖 1 中估計在初始時 (  $\tau = 0$  )，

$$q_{400} \approx 3.5 \times 10^{-4} \text{ g/g,}$$

$$q_{450} \approx 6.9 \times 10^{-4} \text{ g/g,}$$

$$q_{500} \approx 1.2 \times 10^{-3} \text{ g/g.}$$

則由  $\Delta p = 50 \text{ mb}$ ， $w \approx 1.0 \times 10^{-2} \text{ mb/s}$  可算得在初始

時  $\frac{\partial(\sigma q)}{\partial \sigma} \Big|_{450} \approx 8.6 \times 10^{-8} \text{ g/g-s}$ ，若維持此平流量

不變，則抽光 450 mb 之  $q$  ( $\approx 6.9 \times 10^{-4} \text{ g/g}$ ) 僅約須 8,000 秒，或 2.3 小時。正確之數值計算為當 450 mb 處之水汽因平流而漸減時，此平流量亦應相隨漸減，故不至將該處之水汽抽乾，甚至成負值，但因為在模式中用的二階通量定差法， $q_{475}$  處之值用的是  $q_{450}$  及  $q_{500}$  之平均，故當  $q_{450}$  已因垂直平流而減至甚少時，但因  $q_{500}$  之值仍甚大，故平均後之  $q_{475}$  仍很大而使水汽繼續大量從 450 mb 處平流出去。此點在半小時後 450 mb 之水汽成負值而須用填補法 ( filling method ) 去補成正值。上述之問題也

是一般二階定差法 (second order finite difference scheme) 在處理強梯度場之平流時所產生之通病。

此種水汽平流計算不當所生之結果，究竟對天氣預報有多大之影響，則因預報模式及預報重點之不同而異。簡言之，愈精密之預報模式其所受之影響愈大，愈注重水汽分佈及降雨預報之模式，其受之危害也愈大。於此實例，強下降氣流在預報開始之 6 小時後消失，其對模式所欲預報之低壓發展影響甚微。但在另外一個預報個案中，在沙漠上空一個 700 mb 附近之下降氣流使水汽大量流失而至整個空氣柱內之水汽含量甚少，使夜晚時之長波輻射全無屏障，低層溫度急速下降至甚不合理之值，嚴重影響預報重點。

對全球波譜模式，其水汽之處理面臨另一種問題。在波譜模式中，平流之計算誤差非常小，但在用波譜方法表達分佈複雜之水汽場時，會造成所謂之 Gibbs 現象 ( 為由用 smooth global basis functions 表達之 near discontinuous fields 所生之 overshooting 現象 )，常有負值之水汽出現。有些預報模式用填補法去維持水汽為正值 ( 如 ECMWF )

，有些預報模式則選擇特殊變數如  $\frac{1}{\log(q)}$  去表達水汽而維持  $q$  必為正值 ( 如美國海軍 )，但當模式逐漸改進之今日，這些全球預報模式之預報場能量平衡之統計顯示，在波譜展開水汽時所造成之水汽 artificial source/sink，其大小約為潛熱釋放過程之水汽 source/sink 之 10%，已被列為急待改進之嚴重問題。

### 三、水汽平流計算之數值方法

為避免上述之水汽平流計算時所造成之問題，

我們所尋求之數值方法為當計算強梯度場之平流時其能維持正值 (positive definite)，及保持不變形 (shape preserving)。對一般之線性定差法，若其 dispersion 較小 (不生負值)，則其 diffusion 甚大 (衰減或變形)，若其 diffusion 較小，則 dispersion 較大。大致而言，奇數階之定差法其 dispersion 小，diffusion 強，而偶數階之定差法其 diffusion 小 dispersion 大。但無論多高階，dispersion 之特性必存在，故在定差法時，若要保證 positive definite，則必須具備非線性之考慮，如隨風向之不同而用不同之網格點所差分。在文獻中，現行用於平流計算之方法可大致分成 8 類。現將各類方法簡述於後，並評估其優缺點及其對數值天氣預報之適用性。

① Leapfrog + second order (or fourth order)

finite difference + filling :

此為最經濟之方法，唯因其含無任何物理依據之填補 (filling) 法，在使用時有限制。必須監視此填補之值占整個時間變化量之比例，若比例過高則此法不適合使用，須用較昂貴之其他方法。

對一個簡單之平流方程，

$$\frac{\partial q}{\partial t} + U \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \text{ -----(1)}$$

用蛙跳法 (leapfrog) 及二階定差法可將此方程寫成

$$q_i^{t+\Delta t} = q_i^{t-\Delta t} - \epsilon (q_{i+1}^t - q_{i-1}^t),$$

$$\epsilon \equiv \frac{U\Delta t}{\Delta x} \text{ -----(2)}$$

其對含強梯度之三角形分佈場所計算之平流結果如

圖 2 a 所示。由圖中可見最大負值區是出現在信號區附近且愈遠離則愈小。利用此特性我們可用下列步驟去填補負值區而加強維持原三角形：

- (a) 將所有負值點之值改設為 0，
- (b) 將所有小於最大負值修正量之正值點之值，改設為 0，
- (c) 將所有點之值乘以 (修正前之水汽量和 / 修正後之水汽量和)。

經此填補修正，可維持水汽在平流運動上之守恒，且其如同一個非限性之過濾作用可將小尺度之計算誤差去除，圖 2 b 即顯示經填補修正後之結果，其較圖 2 a 進步甚多，圖 2 c 為四階差分法並經填補修正後之結果，其位置之計算較二階之結果為佳。

② Donor cell (upstream, forward scheme) :

此為一個非常普遍使用之水汽平流數值方法，特別是在垂直方向之平流計算。對(1)之平流方程而言，此方法之計算為，

$$q_i^{t+\Delta t} = q_i^t - \frac{\epsilon}{2} (q_i^t - q_{i-1}^t), \text{ 如果 } \epsilon > 0;$$

$$= q_i^t - \frac{\epsilon}{2} (q_{i+1}^t - q_i^t), \text{ 如果 } \epsilon < 0.$$

即是在時間上用 forward scheme 而在空間上用偏向近風方向之一階定差法。此式可改寫為

$$q_i^{t+\Delta t} = q_i^t - \frac{\epsilon}{2} (q_{i+1}^t - q_{i-1}^t) + \frac{|\epsilon|}{2} (q_{i+1}^t - 2q_i^t + q_{i-1}^t) \text{ -----(4)}$$

其如同用二階之定差法加上一個 Laplace diffusion

項。其對含強梯度之三角形分佈場所計算之平流結果如圖 3。由圖中可見此方法計算之結果不生負值，且保持一個頂峯 (peak) 之分佈，此特性稱之為 Monotonicity，為設計強梯度場平流計算方法上之一重要目標。另外，此方法之平流位置計算亦甚佳。然而 Donor Cell 法最大之缺點為其 diffusion 太強，不適合做較長期之平流計算。但在大尺度模式中，因垂直運動速度不大，且水汽在垂直方向之主要傳輸為對流作用，故平流上之強 diffusion 對水汽之垂直分佈影響不太大，而多採用 Donor Cell 來計算水汽之垂直平流。對小尺度模式，模式中之垂直運動速度可甚大，Donor Cell 造成之 damping 作用值得重新評估。

③ Upstream biased high-order finite difference scheme :

為降低 diffusion 但又要避免 dispersion 所造成之不合理負值結果，一般常用之高階方法為三階的 Runge-Kutta type schemes (用中程步驟或 predictor + corrector 法)。Runge-Kutta 類之數值方法有一特性為 n-th order scheme 有  $n+1$  個 parameters，其所多出一個 parameter 可因不同之目的而選擇之，以減少最欲去除之誤差。Takacs (1985) 之三階 upstream biased 法即為由估計計算值與理論值之誤差而選擇比 free parameter 而使誤差為最小。Hsu and Arakawa (1990) 將 Takacs 法更進一步規化成 positive-definite 的三階，upstream biased scheme。Hsu and Arakawa 法之細節計算步驟可參考其原文獻或 Kuo (1989) 之研究報告。圖 4 選自 Kuo (1989) 之報告，可見 Hsu and Arakawa 法無論在形狀 (shape) 或位置上之計算均甚佳，遠超過其他方法之結果。唯其步驟較多，須付甚高之

計算代價，較適合用於須高精度度之平流計算，如污染物或浮懸物 (aerosols) 之平流計算，或雲模式中之水汽平流計算。

④ Spectral method + filling :

波譜法為計算空間微分最精確的方法，但如前所述，其在對水汽分佈的描述上有很大之誤差，會出現不合理之負值，須用如第(1)節中之填補法去維持合理之正值。一般波譜預報模式已視此法不夠精確，而正用 Semi-Lagrangian 法去取代之。

⑤ Semi - Lagrangian Method

Semi-Lagrangian 方法為經由估計網格點上其平流物上來源位置，而將該位置上之值直接移至該網格點上。Semi-Lagrangian 在使用上最大長處為其 time step 不受計算穩定條件 (instability criteria) 之限制，其 time step 之選取，主要之考慮為計算之準確性。semi-Lagrangian 一般含 2 個步驟。第一步驟為決定現在位置上之流體由何處流來，亦即須決定在一個 time step 之前，位於現在位置上之流體其位置何在。決定了位置後，第二步驟為經由內插法求得在上一個 time step 時該位置上平流物之值，此值即為現在位置上之新值。對第一步驟而言，現在一般均採用 Robert (1981) 之 iteration 方法，此方法具三階之準確性且收斂很快 (Kuo and Williams, 1990)。而對第二步驟之選擇則依不同之目的有不同之選擇。為維持計算值為正值 (positive definite) 及保持不變形 (shape preserving)，Williamson and Rasch (1988) 選用三階之 Hermite cubic 內插法，以 Akima (1970) 之方法再加上 monotonic constraints 去估計 Hermite 內插法所須要之差分 (derivative)。他們之結果

顯示對水汽平流之計算非常精確。此方法雖然不確保水汽量守恒（如同使用 filling 方法），但因其為高階之精確度，且此不守恒來至數值計算誤差而非隨意之加入值，故其結果甚佳。圖 5 為其結果之一，顯示用甚之 semi-Lagrangian 方法，在極區附近亦可準確的計算水汽平流，且不生負值。

由於使用波譜法表現水汽分佈時含甚大之誤差，而定差法（finite difference）在極區附近又有計算上之困難，現在一般之全球預報模式均正嘗試用 semi-Lagrangian 法去計算水汽平流。

#### ⑥ Flux Corrected Transport (FCT) :

通量修正傳遞法（FCT）為一種確保平流場為正值之一數值方法。其設計之構想基於低階之數值方法（如 Donor Cell）其可確保平流場為正值且平流位置計算亦甚佳，但 diffusion 太強，故此類方法之基本原理即為選用另一個數值法，與低階法合併使用去修正太強之 diffusion（anti-diffusion）。此修正量之大小則受限於須維持平流場為正值。最簡單而常用之 FCT 法為 Smolarkiewicz (1983) 所提出之 antidiffusion 法。其法為使用 Donor Cell 二次，第一次為一般之 Donor Cell，第二次則為用 Donor Cell 之計算經由一選定之 "anti-diffusion velocity" 去修正第一次之平流值。對方程式①而言，此計算法為：

$$\text{步驟 1: } q_i^* = q_i^t - \frac{e}{2} (q_{i+1}^t - q_{i-1}^t) + \frac{|e^*|}{2} (q_{i+1}^t - 2q_i^t + q_{i-1}^t),$$

$$\text{步驟 2: } q_i^{t+\Delta t} = q_i^* - \frac{e^*}{2} (q_{i+1}^* - q_{i-1}^*) + \frac{|e^*|}{2} (q_{i+1}^* - 2q_i^* + q_{i-1}^*),$$

$$-2q_i^* + q_{i-1}^*).$$

$$\text{其中 } e^* = \frac{\bar{u}\Delta t}{\Delta x},$$

$$\bar{u} = \frac{(|u|\Delta x - \Delta t u^2)(q_{i+1}^* - q_i^*)}{(q_{i+1}^* + q_i^* + s)\Delta x} \times s,$$

$$s = 1.0 \times 10^{-15},$$

s 為可調整之值 (s < 4)。

$\bar{u}$  即為 antidiffusion velocity 圖 6 中顯示其結果大大改善了 Donor Cell 之結果，但與較高階之 Hsu and Arakawa 之結果相比較，此結果仍差些。但其計算簡單，且可調整 s 去增強 antidiffusion 之效果，故在計算平流時，如須較精確之值，此為最廣泛使用之方法之一。

#### ⑦ Piecewise Fitting Method :

此為一種 finite volume method 其與定差法 (finite difference) 最大之不同為其用網格點之區域 (a grid zone) 平均值，而非單點值來表現物理量之分佈。故在每一個 grid zone 之內，用一個事先選定之分佈曲線去 fit 其平均值，在做曲線 fitting 時除考慮質量守性外，並考慮 monotonic 之特性，但其允許在 grid zone 間有不連續性，平流作用即為將每一 grid zone 內 fit 出之分佈曲線以 semi-Lagrangian 之方式移至新位置，而後再對分佈在 grid zone 內做積分而算得新之網格點上之區域平均值。圖 7 簡示其計算步驟。

此法非常昂貴，但其維持 Shock wave 之 discontinuities 非常佳，常用於航空工程之模擬模式。圖 8 顯示其平流三角形分佈場之結果，顯然較 Donor Cell 或 Smolarkiewicz 之 FCT 法均好。但因為

此法是 volume method 有將分佈場變成方形分佈之傾向，除非對高精確度要求之平流計算（如輻射物污染之平流計算），此方法也許代價太高。

#### (8)其他方法

其他可用之數值方法有 finite element 法及 method of moments。因其計算複雜，使用者並不普遍。

## 四、結語

縱合以上 8 類計算水汽平流之數值方法，若對精確度要求不高之模式，第一類及第二類較適用對全球波譜模式，semi-Lagrangian 法為將來發展之方向。至於對高精確度要求之雲模式或高解析度天氣預報模式用於降響預報，Hsu and Arakawa 及 Smolarkiewicz 法應為較佳之選擇。

## 參考文獻

Carpenter, R.J., K.K. Droegemeier, P.R.

Woodward, and C.E. Hane, 1990 :

Application of the piecewise Parabolic method (PPM) to meteorological modeling. Mon. Wea. Rev., 118, P586-612.

Hsu, Y.-J., and A. Arakawa, 1990 : Numerical Modeling of the atmosphere with an isentropic vertical coordinate. Mon. Wea. Rev., 118 P1933-1959.

Kuo, H.-C., 1989 : Tests of various finite difference algorithms applied to a simple water vapor transport problem on a staggered grid. Technical Report, TR 89-04, NEPRF, Morterly, CA.

Kuo, H.-C., and R.T. Williams, 1990 : Semi-Lagrangian solutions to the inviscid Burgers equation. Mon. Wea. Rev., 118

P1278-1288.

Rood, R.B., 1987 : Numerical advection algorithms and their role in atmospheric transport and chemistry models. Rev. of Geoph., vol 25, No.1, P71-100.

Smolarkiewicz, P.K., 1983 : A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion. Mon. Wea. Rev., 111, P479-486.

Takacs, L.L., 1985 : A two-step scheme for the advection equation with minimized dissipation and dispersion errors. Mon. Wea. Rev., 113, P1050-1065.

Williamson, D.L., and P.J. Rasch, 1989 : Two-dimensional semi-Lagrangian transport with shape-preserving interpolation. Mon. Wea. Rev., 117, P102-129.

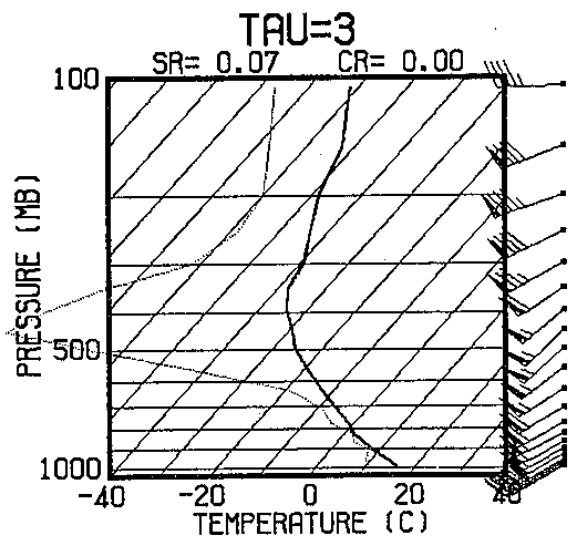
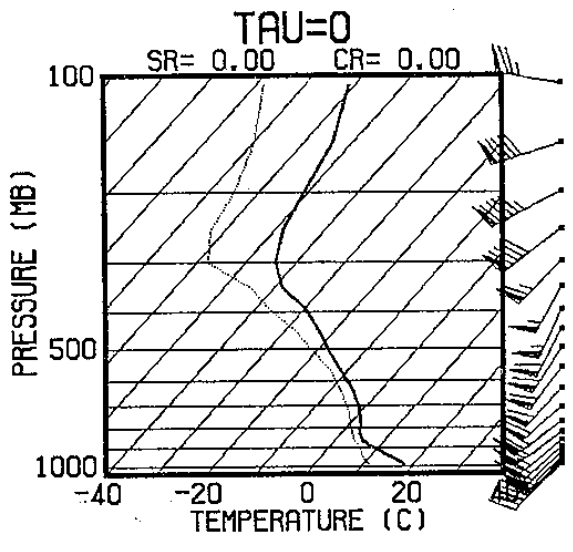


圖 1：水汽平流預報不當之實例，實線為溫度，點線為露點。

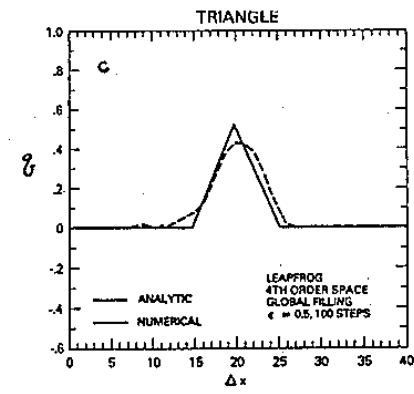
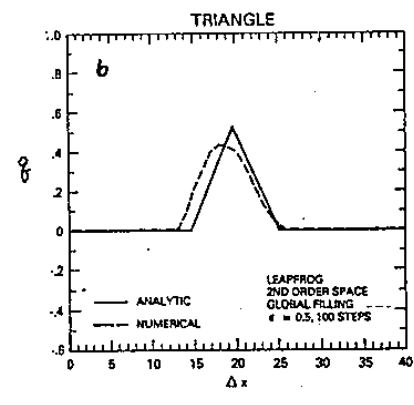
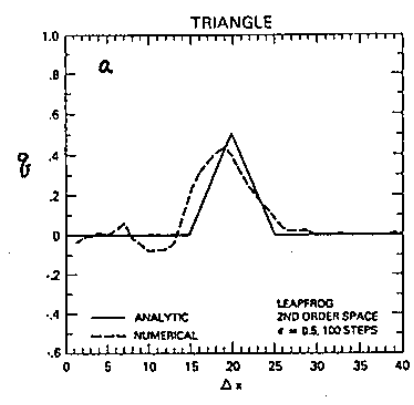


圖 2：用蛙跳法十二階（或四階）定差法+填補法之平流計算，(a)用二階定差法 (b)加用填補法 (c)用四階定差法及填補法。（引至 Rood, 1987）

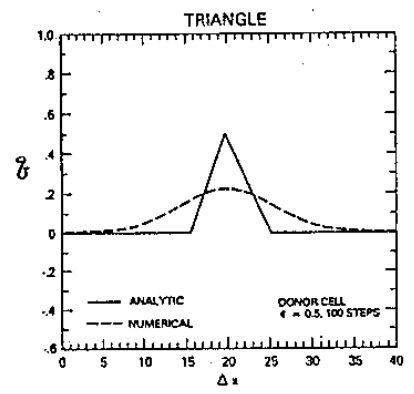


圖 3：Donor Cell 對三角形分佈場之平流計算。（引至 Rood, 1987）

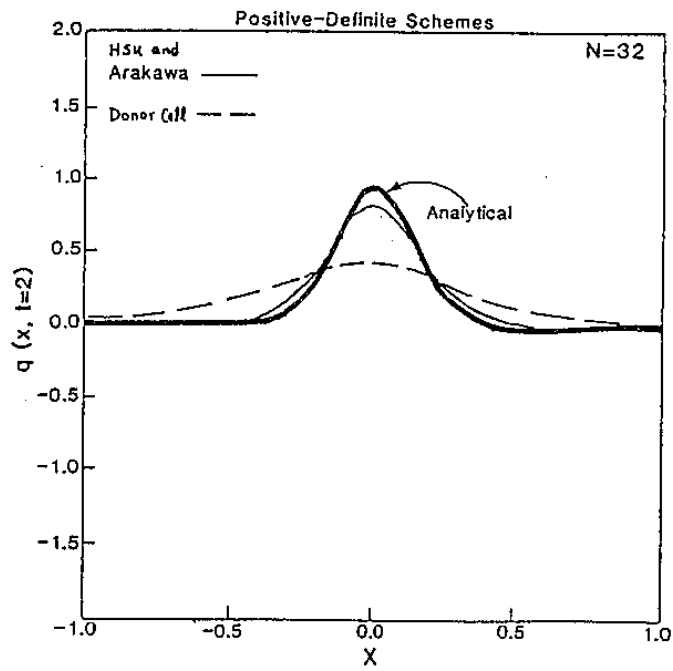


圖 4：Hsu and Arakawa 法與 Donor Cell 法之計算結果比較。(引至 Kwo, 1989)

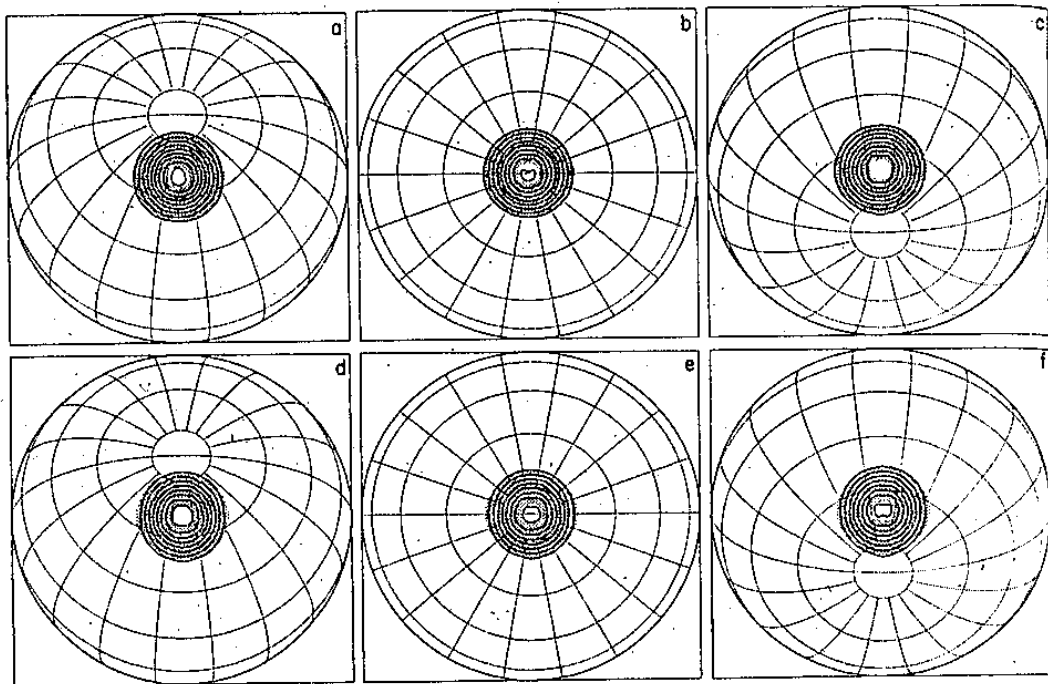


圖 5：Semi-Lagrangian 法在極區附近之平流計算結果。(引至 Williamson and Rasch, 1989)



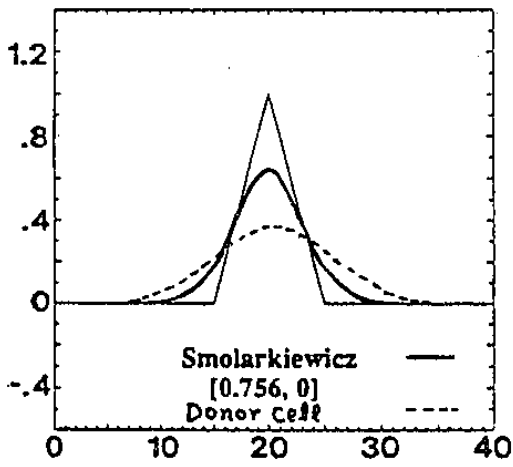


圖 6：Smolarkiewicz 法 ( FCT ) 與 Donor Cell 之計算結果比較。(引至 Carpenter et.al., 1990)

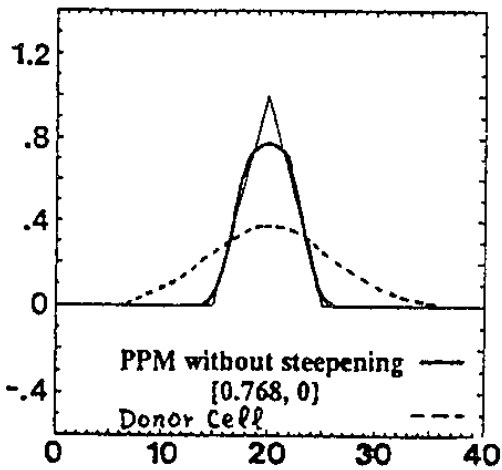


圖 8：Piecewise fitting method 與 Donor Cell 方法之計算結果比較。(引至 Carpenter et.al., 1990)

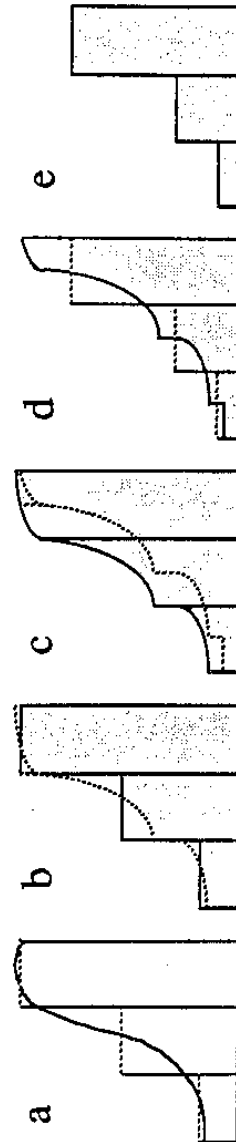


圖 7：Piecewise fitting method 之步驟簡示圖，(a)由初始分佈求得 grid zone 之平均值，(b)用拋物線去 fit 算得之平均值，(c)平流 fit 得之分佈曲線 (由實線平流至虛線)，(d)由新得之分佈曲線計算 grid zone 之平均值，(e)平流結果。(引至 Carpenter et.al., 1990)

# A review numerical methods for moisture advection

Chi-Sann Liou

MASL

Monterey, CA

In the atmosphere, moisture is distributed with sharp gradient, especially in the vertical. Improper choice of numerical methods for moisture advection may lead to unrealistic results, e.g. negative moisture. The problem becomes even more serious when the model physics calculation keeps improving so that the forecasts are more sensitive to the moisture distribution. The paper first provides an example of this problem occurred in an operational NWP model. Numerical methods which are suitable for moisture advection calculation are then reviewed and discussed on their advantage and disadvantage.