

# 平流扩散差分方程的新正定性重整化方案 设计和试验\*

郝世峰<sup>1)†</sup> 崔晓鹏<sup>2)</sup>

1) (浙江省气象台, 杭州 310017)

2) (中国科学院大气物理研究所云降水物理与强风暴实验室, 北京 100029)

(2011年4月18日收到; 2011年5月24日收到修改稿)

质量守恒是平流扩散差分方程所必须满足的基本性质, 但是由于差分格式不具有正定性 (positive-definite), 因此在积分过程中负质量的产生会导致总质量不守恒. 针对这一问题, 本文从负质量产生的物理意义出发, 提出了一个简单有效的新的正定性重整化方案, 通过点源平流扩散试验表明, 该方案不但解决了平流扩散差分方程的正定性问题, 同时保证了总质量守恒性. 与 WRF 模式中采用的“重整化方案”相比, 具有物理含义清楚、并且简单易行的优点.

**关键词:** 正定性, 重整化方案, 质量守恒

**PACS:** 92.60.Wc

## 1 引言

大气运动基本方程组数值积分常用的方法是有限差分方法. 在用差分方程代替微分方程时, 有限差分格式的构造是一个非常重要的问题, 因为差分方程必须满足微分方程的一些基本物理特征, 其中大气整体质量守恒性质是守恒差分格式所必需满足的一个最基本的性质 ( $\partial/\partial t \int \rho dA = - \int \nabla \cdot \mathbf{V} dA = 0$ , 其中  $A$  为全球大气或某一封闭区域). 很多差分格式都具有这一属性, 即  $\sum \delta\rho/\delta t = 0$ , 但是由于密度具有正定性 (positive-definite), 而差分格式并不具有正定性, 所以并不能保证密度不为负值, 因此  $\sum \delta\rho/\delta t = 0$  只是质量守恒的必要条件, 而非充要条件. 国内关于这种由于差分格式无正定性, 而导致质量不守恒问题的相关研究很少. 2000年徐大海和朱蓉<sup>[1]</sup>在研究平流扩散箱格模式时指出, “平流扩散方程的差分模式存在污染物不守恒问题”, 正是这一点严重影响了平流扩散差分模式在污染扩散领域的应

用. 国际上很早就开始研究差分方程的正定性问题, 但相关文献并不多. 1989年 Bott<sup>[2]</sup>提出了“非线性重整化方案”(nonlinear renormalization), 通过对通量的控制 (flux-limiter), 确保了差分方程在积分过程中的质量始终为正, 虽然不会有负值出现, 但是并没有解决质量守恒的问题, 在他的一维平流理想试验中都存在一定的质量误差. 1989年 Smolarkie对 Bott的方法做了进一步的研究<sup>[3]</sup>, 并将其扩展到三维平流差分方案中, 理想实验也取得了较满意的结果, 但仍然没有解决质量守恒问题. 2006年 Skamarock在 Bott和 Smolarkie的工作基础上做了进一步的发展<sup>[4]</sup>, 将其应用到采用大时间步长的平流方程积分方案中, 理想实验取得了比较满意的结果. 以上工作均是建立在简单理想实验的基础上, 并且均没有解决质量守恒问题. 2009年 Skamarock对非线性重整化方案做了进一步完善<sup>[5]</sup>, 解决了守恒性的问题, 并将其成功应用到天气预报模式 WRF水汽平流方程中, 明显改善了 WRF模式的系统性累计降水偏大问题.

\* 国家重点基础研究发展计划项目 (批准号: 2009CB421505)、浙江省气象局开放专项 (批准号: kf2007007)、浙江省科技厅面上科研社会发展项目 (批准号: 2008C23012) 和国家自然科学基金海峡两岸合作研究项目 (批准号: 40921160379) 资助的课题.

† E-mail: shifenghao@yahoo.com.cn

通过分析 Skamarock 等的“重整化方案”，作者认为“重整化方案”主要侧重于利用数学方法控制负值的出现，进而解决正定性和质量守恒问题（详见第 3 节），其物理含义比较模糊；并且对于如何解决扩散项的问题，没有论述。据此，本文提出了一种物理意义清楚的“新正定性重整化方案”，并开展了简单试验。

## 2 质量的正定性导致差分方程质量不守恒的理论分析

普遍形式的连续方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u}{\partial x} - \frac{\partial \rho v}{\partial y} - \frac{\partial \rho w}{\partial z}, \quad (1)$$

其中  $\rho$  为大气中的某种气态混合物密度，(1) 式差分方程的显示时间积分方程为

$$\rho^{t+\Delta t} = \rho^t + \frac{\delta \rho^t}{\delta t} \Delta t, \quad (2)$$

方程 (2) 中上标表示时间层， $\Delta t$  为时间步长。(2) 式成立的必要条件是：在时间步长  $\Delta t$  时段内  $\partial \rho^t / \partial t \approx \delta \rho^t / \delta t$ ，因此  $\rho^t$  必须在  $\Delta t$  时段内连续可导，由于密度具有最基本的属性  $\rho \geq 0$ ，因此当  $\delta \rho^t / \delta t < 0$  时，只要  $\Delta t > -\rho^t / \frac{\delta \rho^t}{\delta t}$ ，则有  $\rho^{t+\Delta t} < 0$ 。也就是说，在  $\Delta t$  时段内会出现某一点  $t_0$  使得  $\rho^{t_0} = 0$ ；由于  $\rho$  不能为负，因此在  $t_0$  时刻  $\rho$  不可导，故  $\partial \rho^t / \partial t \approx \delta \rho^t / \delta t$  不成立，因此在利用 (2) 式积分时在该时段不成立，所以尽管差分格式满足  $\sum \delta \rho^t / \delta t = 0$  成立，但由于不具有约束  $\rho \geq 0$  的属性，因此导致“负质量”出现，所以  $\sum \delta \rho^t / \delta t = 0$  只是总质量守恒的必要条件而非充分条件。

## 3 WRF 模式重整化方案介绍及存在的问题

WRF 模式是目前国际上比较先进的数值模式，在国内被广泛地应用于业务和科研，如台风研究等 [6]。由于动力学方程采用 Euler 方法计算，虽然传输方程的差分方案满足质量守恒的必要条件，但并不具有正定性，因此 WRF 模式在积分过程存在“负的水汽质量”问题，导致累计降水系统性偏大。为解决这一问题 2009 年 Skamarock 开展了如下重整化工作 [5]。

WRF 模式采用 3 阶 Runge-Kutta 时间积分方案，将时间步长  $\Delta t$  分成 3 步积分，

$$\frac{\partial \mu \phi}{\partial t} + \frac{\partial \mu \phi u}{\partial x} + \frac{\partial \mu \phi v}{\partial y} + \frac{\partial \mu \eta \phi}{\partial \eta} = \mu S_\phi, \quad (3)$$

$$(\mu \phi)^{t+\Delta t} = (\mu \phi)^t - \Delta t \left( \sum_i \delta_{xi} F_{xi}^{**} - \mu S_\phi^t \right), \quad (4)$$

方程 (3) 为 WRF 模式中的传输方程，方程 (4) 为 Runge-Kutta 时间积分方案的第三步，方程 (3)，(4) 及以下方程均采用文献 [5] 中的符号，上标“\*\*\*”表示第二步  $t + \Delta t / 2$  时间层， $\phi$  为混合比， $\mu$  为气块密度， $\delta_{xi} F_{xi}$  表示  $i$  坐标系格点区域通量的中央差分算子。“重整化方案”就是针对积分的第三步，即方程 (4) 进行的。具体采用如下方程 (5) 和 (6) 对通量项进行修正。

$$(\mu \phi)^{***} = (\mu \phi)^t + \Delta t \mu S_\phi^t, \quad (5)$$

$$(\mu \phi)^{t+\Delta t} = (\mu \phi)^{***} - \Delta t \sum_i \delta_{xi} [F_{xi}^{1***} + R(F_{xi}^{cor**})]. \quad (6)$$

Skamarock [5] 认为，负混合比的产生是由于差分代替微分造成的误差所引起，因此将通量  $F_{xi}^{***}$  分解成一阶通量  $F_{xi}^{1***}$  和高阶通量  $F_{xi}^{cor**}$  两部分，由于 WRF 模式采用高精度空间差分算子，因此负混合比是由高阶通量所引起。

$$F_{xi}^{cor**} = F_{xi}^{***} - F_{xi}^{1***}, \quad (7)$$

$$\widetilde{\mu \phi} = (\mu \phi)^{***} - \Delta t \sum_i \delta_{xi} F_{xi}^{1***}, \quad (8)$$

对于一个气块，由于净流出使得气块内物质减少，净流入使得气块内物质增加，因此负混合比的产生，是由于气块内净流出量的误差所引起，并归结为流出通量的高阶项引起。用上标“+”表示流出，如果

$$\widetilde{\mu \phi} < \Delta t \sum_i \delta_{xi} (F_{xi}^{cor**})^+, \quad (9)$$

则有  $(\mu \phi)^{t+\Delta t} < 0$ 。因此通过对气块流出通量项的高阶项修正即可约束负值的出现，方法如下。如果 (9) 式成立则

$$R(F_{xi}^{cor**})^+ = (F_{xi}^{cor**})^+ \widetilde{\mu \phi} \left[ \Delta t \sum_i \delta_{xi} (F_{xi}^{cor**})^+ \right]^{-1}, \quad (10)$$

否则  $R(F_{xi}^{cor**})^+ = (F_{xi}^{cor**})^+$ ，不做修正。进而利用 (6) 式即可得到下一时次的预报。详细论述可参考文献 [5]。

从以上方法的阐述可知,“重整化方案”通过修正  $t$  时刻的流出通量的高阶项,使得在  $\Delta t$  时间步长内气块的流入和流出量刚好平衡,使得  $(\mu\phi)^{t+\Delta t} = 0$ . 该方法的数学表述非常简单,但存在三个问题. 问题一,描述的物理过程存在问题,因为流出通量只与  $\mu\phi$  和风速有关,与时间步长  $\Delta t$  并无关系,但从方程 (8) 和 (10) 可以看出流出通量的大小与  $\Delta t$  有关,修正后的通量在  $\Delta t$  时间步长内气块的流入和流出量刚好平衡,这一点缺少物理依据,真实的物理过程正如在第二节中理论分析的情况,在  $\Delta t$  时段内存在时间点  $t_0$ , ( $t \leq t_0 \leq t + \Delta t$ ) 使得  $(\mu\phi)^{t_0} = 0$ , 在  $t_0$  至  $t + \Delta t$  时段的流出通量应该为零. 问题二,将满足条件方程 (9) 式的格点的流出通量修正后,由于流出到相邻下游格点的质量减少会使得下游格点的质量有可能由正变为负,也就是说会对下游一系列格点的值产生影响,对于这一点 Skamarock 在 WRF 的重整化方案中 (文献 [5]) 并没有指出. 因此如认为负值仅仅是由于通量项的计算误差引起,在  $t$  时刻对流出通量进行控制,那么实际实现过程将比较复杂. 问题三, Skamarock 在重整化方案中只讨论了平流项的重整化方法,未涉及扩散项的问题,而扩散项在风速较小的情况下是一个不可忽略的重要项,因此其重整化方法并不完整.

综上所述,文献 [2—5] 只是用数学方法解决正定性问题,将负质量问题 (负混合比) 仅仅归结为通量误差引起,并给以修正,其物理模型存在一定问题,忽略了扩散项的作用,并且实现方法较为复杂. 本文将提出一种简洁、且物理含义清楚的“新正定性重整化方法”.

#### 4 平流扩散方程的新正定性重整化方法

为简单起见,以二维平流方程为例对本方法进行阐述.

图 1 中,格点  $(i, j)$  所代表的区域 (虚线矩形区域),在  $\Delta t$  时段内的质量变化为

$$\begin{aligned} \Delta m_{ij} = & [(\mu\phi u)_{i,j-1/2}\Delta y - (\mu\phi u)_{i,j+1/2}\Delta y \\ & + (\mu\phi v)_{i-1/2,j}\Delta x \\ & - (\mu\phi v)_{i+1/2,j}\Delta x] \Delta t, \end{aligned} \quad (11)$$

其中  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  分别为  $x$  方向和  $y$  方向的格距. (11) 式具有非常明确的物理含义,即区域  $(i, j)$

的质量变化等于该区域边界处流入流出量的总和,以区域  $(i, j)$  的东边界 (右侧虚线) 为例,如  $(\mu\phi u)_{i,j+1/2}\Delta y\Delta t > 0$  说明由区域  $(i, j)$  流出,相对于区域  $(i, j + 1)$  则为流入且大小相等. 以区域  $(i, j)$  的西边界 (左侧虚线) 为例,如  $(\mu\phi u)_{i,j-1/2}\Delta y\Delta t < 0$  说明由区域  $(i, j)$  流出,相对于区域  $(i, j - 1)$  则为流入,且大小相等. 同理  $y$  方向亦然.

将 (11) 式除以  $\Delta x\Delta y\Delta t$ , 可得

$$\begin{aligned} \frac{\Delta(\mu\phi)_{ij}}{\Delta t} = & \frac{(\mu\phi u)_{i,j-1/2}}{\Delta x} - \frac{(\mu\phi u)_{i,j+1/2}}{\Delta x} \\ & + \frac{(\mu\phi v)_{i-1/2,j}}{\Delta y} \\ & - \frac{(\mu\phi v)_{i+1/2,j}}{\Delta y}, \end{aligned} \quad (12)$$

当  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta t$  趋于零时, (12) 式便变为 (3) 式的二维微分方程,即 (12) 式是 (3) 式的无源汇项的二维差分方程. 因此在用 (12) 式做数值积分计算时,  $(\mu\phi)_{ij}^{t+\Delta t} < 0$  所表示的物理含义是区域  $(i, j)$  在  $t$  到  $t + \Delta t$  时段内的虚假的流出量,和其相邻的下游格点区域虚假的流入量,且大小相等. 因此,修正负质量 ( $(\mu\phi)_{ij}^{t+\Delta t} < 0$ ) 的问题可归结为如何去掉虚假的流入和流出量的问题.

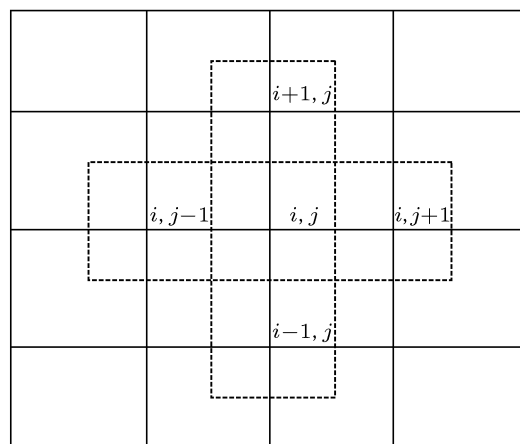


图 1 二维平流方程差分格点示意图 实线交叉点为差分格点,虚线矩形区域表示格点代表的区域

用  $F_{i,j-1/2}$ ,  $F_{i,j+1/2}$ ,  $F_{i-1/2,j}$ ,  $F_{i+1/2,j}$  分别表示区域  $(i, j)$  四个边界上的通量,显然在  $\Delta t$  时段内各边界通量大小的比值有如下关系:

$$\begin{aligned} & |F_{i,j-1/2}| : |F_{i,j+1/2}| : |F_{i-1/2,j}| : |F_{i+1/2,j}| \\ = & \left| \frac{(\mu\phi u)_{i,j-1/2}}{\Delta x} \right| : \left| \frac{(\mu\phi u)_{i,j+1/2}}{\Delta x} \right| \end{aligned}$$

$$\left| \frac{(\mu\phi v)_{i-1/2,j}}{\Delta y} \right| : \left| \frac{(\mu\phi v)_{i+1/2,j}}{\Delta y} \right|. \quad (13)$$

既然各边界上通量在  $\Delta t$  时段内存在上述比例关系, 与时间无关, 那么, 当  $(\mu\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} < 0$  时, 区域  $(i, j)$  下游相邻区域的虚假流入量, 也有同样的比例关系. 因此只需将下游相邻区域的虚假流入量减掉即可.

令

$$G_{i,j}^{t+} = |G_{i,j-1/2}^{t+}| + |G_{i,j+1/2}^{t+}|$$

$$\begin{cases} (\mu\phi)_{i,j-1}^{t+\Delta t} = (\mu\phi)_{i,j-1}^{t+\Delta t} + (\mu\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} |G_{i,j-1/2}^{t+}/G_{ij}^{t+}| & (\mu\phi v)_{i,j-1/2}^t < 0, \\ (\mu\phi)_{i,j+1}^{t+\Delta t} = (\mu\phi)_{i,j+1}^{t+\Delta t} + (\mu\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} |G_{i,j+1/2}^{t+}/G_{ij}^{t+}| & (\mu\phi v)_{i,j+1/2}^t > 0, \\ (\mu\phi)_{i-1,j}^{t+\Delta t} = (\mu\phi)_{i-1,j}^{t+\Delta t} + (\mu\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} |G_{i-1/2,j}^{t+}/G_{ij}^{t+}| & (\mu\phi v)_{i-1/2,j}^t < 0, \\ (\mu\phi)_{i+1,j}^{t+\Delta t} = (\mu\phi)_{i+1,j}^{t+\Delta t} + (\mu\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} |G_{i+1/2,j}^{t+}/G_{ij}^{t+}| & (\mu\phi v)_{i+1/2,j}^t > 0. \end{cases} \quad (14a)$$

第二步, 扣除虚假流出量, 令

$$(\mu\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} = 0. \quad (14b)$$

由于  $|G_{i,j-1/2}^{t+}|/|G_{i,j}^{t+}| + |G_{i,j+1/2}^{t+}|/|G_{i,j}^{t+}| + |G_{i-1/2,j}^{t+}|/|G_{i,j}^{t+}| + |G_{i+1/2,j}^{t+}|/|G_{i,j}^{t+}| = 1$ , 所以整个积分区域在虚假流入、流出量扣除前后  $\sum_{ij}(\mu\phi)^{t+\Delta t}$  不变.

与 WRF 中采用的重整化方案不同, 新重整化方案是在  $t + \Delta t$  时间层对  $(\mu\phi)^{t+\Delta t}$  的预报结果进行重整, 而不是在  $t$  时间层重整通量项. 采用新重整化方案进行修正时, 由于虚假的流入量被扣出, 在  $t + \Delta t$  时间层为正值下游格点有可能会变为负值, 这说明该格点区域也存在虚假的流出量, 因此只需利用 (14) 式重复修正多次直至没有负值为止, 实现总质量守恒.

以上研究了平流项的正定性重整化方法. 对于如何考虑扩散项对正定性的影响, 关键在于如何确定扩散通量. 通常将扩散项表示为  $k\nabla^2\mu\phi$ , 其中  $k$  为扩散系数. 三阶精度的  $X$  方向水平差分算子为

$$k \frac{\delta^2(\mu\phi)_{ij}}{\delta x^2} = k \times \frac{(\mu\phi)_{i,j+1/2} - 2(\mu\phi)_{ij} + (\mu\phi)_{i,j-1/2}}{\Delta x^2}. \quad (14)$$

由于扩散的方向总是由高浓度区指向低浓度区, 将 (14) 式变化为

$$k \frac{\delta^2(\mu\phi)_{ij}}{\delta x^2} = k \frac{(\mu\phi)_{i,j-1/2} - (\mu\phi)_{ij}}{\Delta x^2} - k \frac{(\mu\phi)_{ij} - (\mu\phi)_{i,j+1/2}}{\Delta x^2}. \quad (15)$$

$$+ |G_{i-1/2,j}^{t+}| + |G_{i+1/2,j}^{t+}|$$

在东西方向, 如果为流出边界则  $G_{i,j\pm 1/2}^+ = \frac{(\mu\phi v)_{i,j\pm 1/2}}{\Delta x}$ , 否则  $G_{i,j\pm 1/2}^+ = 0$ , 在南北方向如果为流出边界则  $G_{i\pm 1/2,j}^+ = \frac{(\mu\phi v)_{i\pm 1/2,j}}{\Delta y}$ , 否则  $G_{i\pm 1/2,j}^+ = 0$ . 新正定性重整化方案分为两步, 如果  $(\mu\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} < 0$ , 则首先对下游格点的虚假流入量进行扣除

因此容易得到单位体积区域  $(i, j)$  的东、西边界单位面积上的扩散通量分别为  $k[(\mu\phi)_{ij} - (\mu\phi)_{ij+1/2}]/\Delta x$  和  $k[(\mu\phi)_{ij-1/2} - (\mu\phi)_{ij}]/\Delta x$  两项. 同理可得南北方向单位面积上的扩散通量. 将 (12) 式加入扩散项, 并将各界面上的平流项和扩散项合并后得平流扩散差分方程:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta(\mu\phi)_{ij}}{\Delta t} = & \left[ \frac{(\mu\phi v)_{i,j-1/2}}{\Delta x} \right. \\ & \left. + k \frac{(\mu\phi)_{ij-1/2} - (\mu\phi)_{ij}}{\Delta x^2} \right] \\ & - \left[ \frac{(\mu\phi v)_{i,j+1/2}}{\Delta x} \right. \\ & \left. + k \frac{(\mu\phi)_{ij} - (\mu\phi)_{ij+1/2}}{\Delta x^2} \right] \\ & + \left[ \frac{(\mu\phi v)_{i-1/2,j}}{\Delta y} \right. \\ & \left. + k \frac{(\mu\phi)_{i-1/2,j} - (\mu\phi)_{ij}}{\Delta y^2} \right] \\ & - \left[ \frac{(\mu\phi v)_{i+1/2,j}}{\Delta y} \right. \\ & \left. + k \frac{(\mu\phi)_{ij} - (\mu\phi)_{i+1/2,j}}{\Delta y^2} \right]. \quad (16) \end{aligned}$$

由方程 (16) 式可知, 在  $\Delta t$  时间步长内, 在四个边界上通量大小的比值不变. 因此可利用方程 (14) 同样的方法进行修正.

## 5 新正定性重整化方案数值试验

采用点源平流扩散试验来进行验证“新正定性

重整化方案”的效果. 环境风场采用 WRF 模式的逐小时间隔预报风场, 预报时效为 72 h, 水平格距为 15 km 的, 初始时间为 2011 年 3 月 22 日 20 点. 扩散系数取为常数  $k = 297 \text{ m}^2/\text{s}$ , 点源的起始浓度为  $\rho^0 = 10 \text{ g/m}^3$ , 点源排放率为  $S_\rho = 10 \text{ g/m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ , 积分时间步长为 50 s. 为简单起见, 本试验不验证混合比  $\phi$  而直接验证点源的排放物密度  $\rho = \mu\phi$ . 二维平流扩散微分方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u}{\partial x} - \frac{\partial \rho v}{\partial y} + k \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + k \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + S_\rho. \quad (17)$$

采用的差分算子为

$$\frac{\delta \rho}{\delta t} = -(\bar{\rho}^x \bar{u}^x)_x - (\bar{\rho}^y \bar{v}^y)_y + k \rho_{xx} + k \rho_{yy} + S_\rho, \quad (18)$$

该差分算子不仅满足质量守恒的必要条件 (一次守恒的性质)  $\sum_{ij} \delta \rho / \delta t = 0$ , 而且平流算子还满足二次守恒性质 [7]. 试验采用三种方案进行对比: 方案一为控制试验方案, 无重整化过程, 在积分过程中对负密度 ( $\rho < 0$ ) 不加任何约束和限制; 方案二在数值积分的每一步后, 将负密度强制性去掉, 也就是令  $\rho < 0$  的格点值为零, 该方法也称为剪切法 (clipping), 是 WRF 模式中处理负水汽混合比时采用的方案之一; 方案三采用“新正定性重整化方案”对  $\rho < 0$  的格点进行修正.

图 2(a) 为 WRF 模式 2011 年 3 月 22 日 20 时启动预报的 24 h 地面风场, 陆地上风速较小, 点源所在位置受偏东风控制, 风速在 2 m/s 左右. 图 2(b) 为 40 h 的预报场, 此时浙江北部和江苏、安徽省已在冷空气西北偏西气流控制下. 这是一次较强冷空气影响过程, 30°N 附近是冷暖空气交汇地带, 因此风向的变化较为复杂, 经历了由偏东风逐渐转向偏西风的过渡, 72 h 后浙江省受较强的偏北风控制 (图略). 三种方案的点源排放物的平流扩散过程与风向的变化非常符合.

图 3(a) 和图 3(b) 分别为方案 1 积分 24 h 和 40 h 后的结果, 由于差分算子 (18) 式并不具有正定性, 因此在结果中出现很多负值区域, 最值得注意的是在点源排放物上风方向有一系列的正、负相间区域, 24 h 和 40 h 预报的负值最大值达到  $-3 \text{ g/m}^3$  和  $-4 \text{ g/m}^3$  以上. 实际上, 在积分的第一步开始就在其上风方的相邻格点产生了负值, 这一点通过 (18) 式很容易验证. 负值在积分过程中不断产生和发展, 由于差分格式满足  $\sum_{ij} \delta \rho / \delta t = 0$ ,

所以总质量满足  $\sum_{ij} \rho^t = \rho^0 + tS_\rho$ , 但由于存在负质量, 所以从物理意义上来讲总质量并不守恒. 图 4 给出了方案 1 中排放物正、负质量相对误差随积分时间的发展变化, 二者大小相等符号相反, 且增长迅速, 仅仅 1 h 积分后总质量相对误差就达到 13.3%, 40 h 预报的总质量相对误差为 122%. 由此可见在积分过程中负质量的出现对预报结果的影响之大. 为了消除负质量影响, 在方案 2 中每一步积分后都将负质量强制性去掉, 虽然积分过程中不受负质量的影响, 但是从图 4 中可以清楚地看到, 方案 2 的总质量误差增长速度要远远大于方案 1. 由图 3(c) 和图 3(d) 也可看出, 虽然点源排放物的主体形态

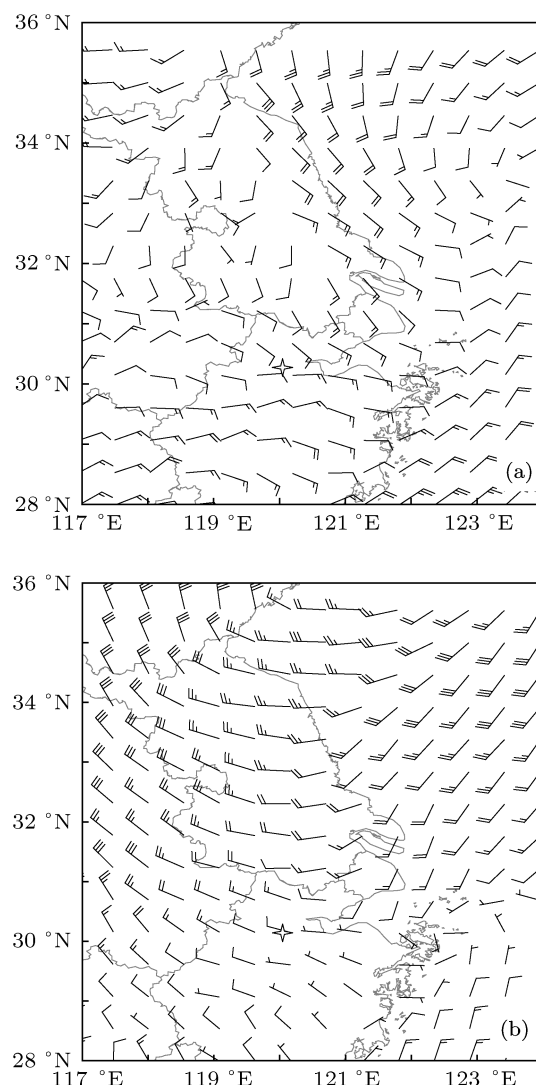


图 2 利用 WRF 模式从 2011 年 3 月 22 日 20 点启动预报的 24 h (a) 和 40 h (b) 地面风场, 星号为点源位置

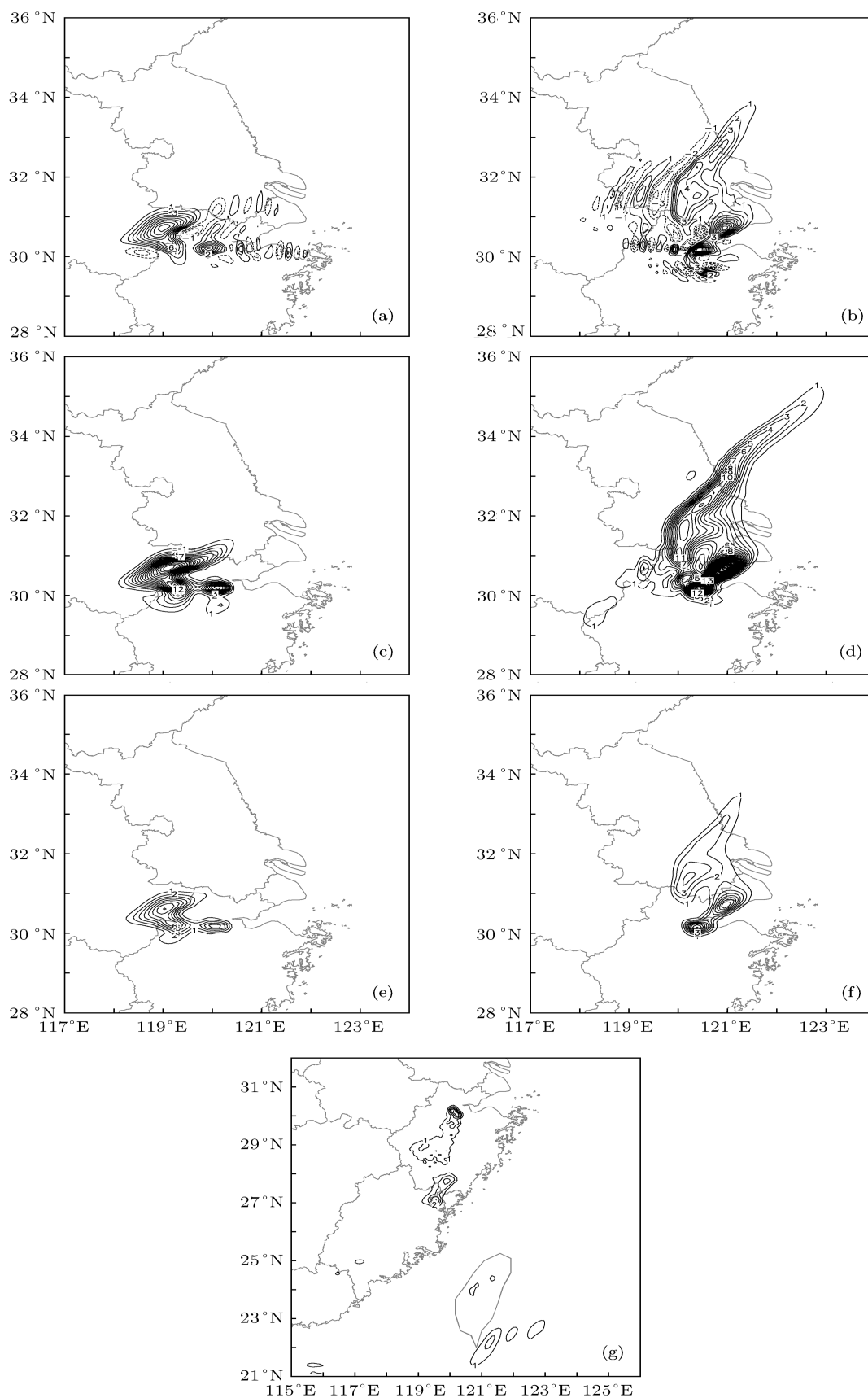


图3 采用方案1的24 h预报(a)和40 h预报(b),采用方案2的24 h预报(c)和40 h预报(d),采用方案3的24 h预报(e),40 h预报(f)和72 h预报(g),等值线间隔1 g/m<sup>3</sup>

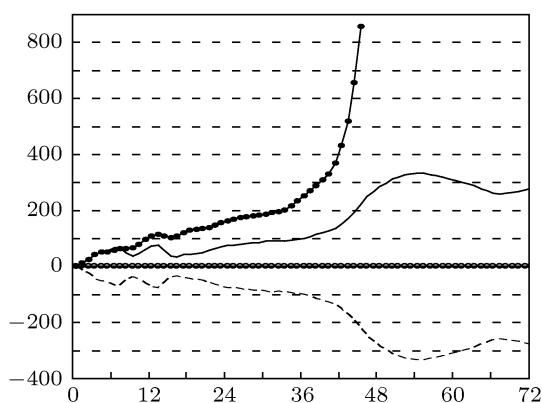


图4 三种方案的质量相对误差 实线为方案1的正总质量值相对误差,虚线为方案1的负总质量相对误差;■为方案2的总质量相对误差;○为方案3的总质量相对误差

和图 3(a) 和图 3(b) 非常相似,但强度和范围要大许多. 方案 2 虽然在每步积分后都将负质量值去掉,但并没有去掉正质量的误差,实际上破坏了差分算子的守恒性质,即  $\sum_{ij} \delta\rho/\delta t \neq 0$ , 导致总质量误差快速增长. 图 3(e) 和图 3(f) 为采用方案 3 积分 24 h 和 40 h 后的结果,和图 3(a)—(d) 相比,不但没有负值出现,而且总质量守恒,误差为零(图 4). 积分 72 h 预报后质量依然守恒,图 3(g).

## 6 结论

质量守恒是数值模式差分格式所必须满足的基本性质,但是由于差分格式自身并不具有正定性属性,因此,差分格式虽然满足  $\sum_{ij} \frac{\delta\rho}{\delta t} = 0$  属性,但并不能避免“负质量”的产生,导致总质量不守恒. 本文从负质量产生的物理意义出发,建立了一种新的“正定性重整化方案”. 通过点源平流扩散试验表明,不具有正定性的方案 1 在积分过程中负质量不断产生和发展,且总质量误差增长迅速. 方案 2 虽然对负值加以控制,但由于破坏了差分格式的守恒性质,故总质量误差远大于方案 1. 本文提出的“新正定性重整化方案”(方案 3) 在 72 h 积分试验中不仅消除了负质量的问题,同时保持了总质量的守恒性. 新正定性重整化方案与 Skamarock 在 WRF 中采用的“重整化方案”<sup>[4,5]</sup> 相比,具有物理含义清楚、总质量守恒、并且容易实现的优点.

“新正定性重整化方案”消除了负质量,解决了质量守恒性的问题,改善了模式系统误差,对于提高数值预报质量,尤其对提高降水预报和污染扩散预报质量有着非常重要的意义,这是本项研究的目的所在.

- [1] Xu D H, Zhu R 2000 *Quart. J. Appl. Meteorol.* **11** 1 (in Chinese) [徐大海, 朱蓉 2000 应用气象学报 **11** 1]  
 [2] Bott A 1989 *Mon. Wea. Rev.* **117** 1006  
 [3] Smolarkiewicz P K 1989 *Mon. Wea. Rev.* **117** 2626  
 [4] Skamarock W C 2006 *Mon. Wea. Rev.* **134** 2241  
 [5] Skamarock W C 2009 *Mon. Wea. Rev.* **137** 488

- [6] Huang S X, Cai Q F, Xiang J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3022 (in Chinese) [黄思训, 蔡其发, 项杰 2007 物理学报 **56** 3022]  
 [7] Zhou Y, Hou Z M, Liu Y D 2003 *Numerical Weather Prediction Basis* (Beijing: China Meteorological Press) p124 (in Chinese) [周毅, 侯志明, 刘宇迪 2003 数值天气预报基础(北京: 气象出版社) 第 127 页]

# Design and experiments of a new positive-definite renormalization scheme for advection-diffusion differential equation\*

Hao Shi-Feng<sup>1)†</sup> Cui Xiao-Peng<sup>2)</sup>

1) (*Zhejiang Meteorology Observatory, Hangzhou 310017, China*)

2) (*LACS, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China*)

(Received 18 April 2011; revised manuscript received 24 May 2011)

## Abstract

Total mass conservation is a basic property of advection-diffusion differential equation. Since the difference schemes is not positive-definite, total mass is not conserved, caused by negative mass in numerical integration. Aiming at this problem, a new positive-definite renormalization scheme is proposed based on the physical meaning of negative mass. Experiments of point-source advection-diffusion show that the new renormalization scheme not only solves the positive-definite problem of advection-diffusion differential equation, but also keeps the property of total mass conservation. Compared with the renormalization scheme in the WRF model, the new positive-definite renormalization scheme has virtues of clear physical meaning and easier manipulation.

**Keywords:** positive-definite, renormalization scheme, total mass conservation

**PACS:** 92.60.Wc

---

\* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2009CB421505), Open Project of Zhejiang Meteorological Bureau, China (Grant No. kf2007007), the Social Development Program of Department of Science and Technology in Zhejiang, China (Grant No. 2008C23012), and the National Natural Science Foundation of China-Regional Cooperation Project (Grant No. 40921160379).

† E-mail: shifenghao@yahoo.com.cn