

高分辨区域输送模式中不同 输送格式的对比试验*

葛孝贞

(南京大学大气科学系, 南京 210093)

J.S. Chang

(ASRC., SUNY., Albany, NY 12205 USA)

雷孝恩

(中国科学院大气物理研究所, 北京 100029)

摘要 本文对两种输送格式在理论试验的基础上, 引入19层高分辨区域输送模式EM3, 由中尺度模式(MM4)提供实例输送风场, 积分至13、18、30、50、70小时, 作分析和对比数值试验。采用的两种格式是: 二阶动量矩守恒的Prather格式(以下简称SOM)及通量订正的Smolar格式。数值试验结果表明, 高精度的SOM格式使数值扩散减小一个量级, 使输送物质(SO_2)中心浓度比Smolar格式增大3~4倍, 采用SOM格式还明显改进了浓度中心水平平均运动轨迹的模拟精度, 选择高精度的平流格式是改进模拟结果的重要途径。

关键词 输送格式 数值扩散 数值频散

1 引言

数值扩散与计算频散是平流格式的两类基本误差, 往往订正了一种误差会使另一种误差更显著, 近35年来已研制和测试了近百余种格式, 从大量的研究试验中尚难确定一种在精确性、计算稳定性、实用性都十分理想的格式。未经订正并且较简单的有限差分格式, 如时间取二阶中心差而空间取二阶或大于二阶差分、上游差分格式、Lax-Wendroff格式等, 仍是某些区域气象问题模式常采用的平流格式, 由于其分别具有不同程度的计算频散、数值扩散, 影响了计算精度。谱、伪谱等都是具有较高精度的方法, 而大量的机时消耗和不能保证正解, 又是一些重要的缺陷。考虑由格点围成的“体积元”格式如本文采用的SOM格式^[1]数值扩散和频散很小, 计算稳定, 能提供高精度的正解结果, 但是又使计算时间, 内存的需求大大增加, 采用的另一种订正的Smolar格式^[2]能保持正解, 省时, 但是又具有明显的数值扩散和频散。本文将对SOM及Smolar两种具有不同误差特征的平流格式进行对比试验, 首先, 将两种格式分别应用于平流方程(1), 在理想旋转风场及圆锥初值(中心值为10.0)分布下测试它们的误差特征, 理想测试表明, SOM格式无数值扩散($R_D \sim 1.0$), 保持质量峰值(浓度中心)衰减小, 无计算负解, 而Smolar格式, 各项误差特征与SOM格式差别显著(见

1994-07-30 收到, 1994-12-29 收到修改稿

* 本研究项目得到国家“八五”攻关85-906-03-05和85-906-04课题的资助

表 1 及图 1)。再将此两种精度明显不同的平流格式, 分别引入区域模式 EM3^[3], 作对比数值试验, 以测试格式精度对模拟结果的影响。为了能推算平流格式在模式运算中可能给模式模拟结果带来数值扩散的量值大小, 先在模式区域的北侧给定一个瞬时点源, 在给定的理想风场下, 模式积分 30 小时, 分析模式输出结果 (见图 2b、2c), 明显说明 Smolar 格式, 使物质浓度中心值在输送过程中迅速衰减, 其中心值仅为模式采用 SOM 格式相应中心值的四分之一, 输送物质的水平范围虚假地扩展, 研究工作^[4]推算表明 Smolar 格式的数值扩散相当于在模式中附加了一大约 $8 \times 10^4 \text{ m}^2/\text{s}$ 的水平扩散。用 Smolar 格式使浓度中心水平运动轨迹有明显位相差, 把它与用 SOM 格式的模拟结果对比, 后者几乎无数值扩散, 无位相误差 (见表 2)。两种格式引入 EM3 模式作实例数值试验, 由中尺度区域模式 MM4 提供实例背景风场, 图 3a、3b、3c、3d 给出模式积分 30 小时的对比结果, 说明其差别是十分可观的。进一步的研究^[5]表明, 这种差别是由于采用高精度的平流格式, 使模拟的浓度水平分布和随高度的分布及随时间的变化更趋向合理所造成的。此外, 实际大气中的水平扩散是提高模式对实际过程模拟能力必需考虑的重要物理过程, 对比试验表明只有选用高精度的平流格式, 才能使模式结果更正确的反映实际水平扩散的作用。

2 两种平流格式

为了研究平流格式的误差对模拟结果的影响, 我们采用以下两种具有不同数值扩散, 频散特征的平流格式进行对比数值试验。

2.1 二阶矩守恒 (SOM) 格式

平流输送方程为

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \psi = 0. \quad (1)$$

为了数值计算平流过程(1), 在被划分为若干个网格的计算域内 (设网格长度分别记为 X, Y, Z , 总计 $N \times M \times L$ 个网格) 某瞬时 t , 任一格点上的函数 $\psi_{ijk}(x, y, z)$ ($i = 1, \dots, N; j = 1, \dots, M; k = 1, \dots, L$) 表示以该点为中心、长度为 X, Y, Z 的“格元”内函数的平均值, 格元体积 $V = XYZ$, 设函数在“格元”内以二阶多项式形式连续分布:

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) = & a_0 + a_x x + a_{xx} x^2 + a_y y + a_{yy} y^2 + a_{xy} xy + a_z z \\ & + a_{zz} z^2 + a_{yz} yz + a_{xz} xz, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 $0 < x < X, 0 < y < Y, 0 < z < Z$, 若“格元”内密度均匀分布, 则格元内总质量 $G M = \rho V$, 表达式(2)的正交多项式形式为

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) = & m_0 K_0 + m_x K_x + m_{xx} K_{xx} + m_y K_y + m_{yy} K_{yy} + m_{xy} K_{xy} \\ & + m_z K_z + m_{zz} K_{zz} + m_{xz} K_{xz} + m_{yz} K_{yz}, \end{aligned} \quad (3)$$

其中正交函数 K_i ($i = 0, x, xx, y, \dots, zz$) 应满足

$$\int K_i K_j = 0, \quad (i \neq j) \quad (4)$$

给定一组满足正交条件(4)的关系式, 为了计算“格元”内在平流输送中函数 ψ 的变化, 利用正交多项式的性质, 并定义一组与多项式系数 m_i ($i = 0, x, xx, \dots, zz$)有关的系数 S_i (称其为矩), 这里仅给出 S_i 的一维表示式:

$$\begin{cases} S_0 = \int dV\psi(x)k_0 = m_0 v, \\ S_x = \frac{b}{X} \int dV\psi(x)k_x = m_x V X / 2, \\ S_{xx} = \frac{30}{X^2} \int dV\psi(x)k_{xx} = m_{xx} V X^2 / 6, \end{cases} \quad (5)$$

其中零阶矩 S_0 表示格元内函数平均值, 一阶矩 S_x 和二阶矩 S_{xx} 分别表示函数的斜率和曲率。任一时刻 t , 格元内函数 $\psi_i(x)$, 用一组 S_i 的组合, 表示为二次连续函数, 在以 v 的平流输送中, 保持一阶、二阶矩守恒, 以格元内 S_i 的改变来确定在格元内函数 ψ 的分布及改变, 随时间积分逐步确定在整个计算域内该分段连续函数随时间的变化。

据 Neumann 方法分析该平流格式的计算稳定性, 将格元内 ψ 分解为有限个 Fourier 分量, 分析其中一个波分量如: $\psi(x) = e^{ikx}$, 在格元内($0 \leq x \leq X$)计算出该分量的 S_i , 检验 S_i ($i = 0, x, xx$)随时间的演变中, 其振幅是否有界, 以及保证其有界应满足的条件, 可得当 $0 < \alpha < 1$ ($\alpha = u\Delta t / X$, u 为一维风速) 计算稳定 (S_0, S_x, S_{xx} 都有界)。

2.2 Smolar 平流格式

平流方程(1)的通量形式 (一维) 为

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u\psi) = 0. \quad (6)$$

在离散的网格点上, 将(6)的差分形式写为

$$\psi_i^{n+1} = \psi_i^n - \{F(\psi_i^n, \psi_{i+1}^n, u_{i+\frac{1}{2}}^n) - F(\psi_{i-1}^n, \psi_i^n, u_{i-\frac{1}{2}}^n)\}, \quad (7)$$

其中 n 表示时间积分步数, ψ_i 表示 n 时间位面上, 格点 i 处的 ψ 值, $F(\psi_i, \psi_{i+1}, u_{i+\frac{1}{2}})$ 和 $F(\psi_{i-1}, \psi_i, u_{i-\frac{1}{2}})$ 分别表示以 i 点为中心, 格距是 Δx 的网格右、左两侧, 边界上的通量计算表达式为

$$F(\psi_i, \psi_{i+1}, u) = [(u + |u|)\psi_i + (u - |u|)\psi_{i+1}] \frac{\Delta t}{2\Delta x}, \quad (8)$$

或将(3)式写成

$$\begin{cases} \psi_i^{n+1} = \psi_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}} - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2}}], \\ \tilde{F}_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}} (\psi_i + \psi_{i+\frac{1}{2}}) / 2 - |u|_{i+\frac{1}{2}} (\psi_{i+1} - \psi_i) / 2, \\ \tilde{F}_{i-\frac{1}{2}} = u_{i-\frac{1}{2}} (\psi_{i-1} + \psi_i) / 2 - |u|_{i-\frac{1}{2}} (\psi_i - \psi_{i-1}) / 2. \end{cases} \quad (9)$$

$|u|_{i+\frac{1}{2}}, |u|_{i-\frac{1}{2}}$ 分别表示格点 i 两侧边界上风速的大小, 为了进一步分析格式的意义, 将表达式中的 $\psi_i^{n+1}, \psi_{i+1}^n, \psi_{i-1}^n$, 在 (x_i, t_n) 处作 Taylor 级数展开, 当 Δt (和 Δx) $\rightarrow 0$ 时

即可将(6)表示为

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_i^n = - \frac{\partial}{\partial x} (u \psi) \Big|_i^n \frac{\partial}{\partial x} \left[(K_{imp_1} \frac{\partial \psi}{\partial x}) \right] \Big|_i^n, \\ K_{imp_1} = 0.5(|u| \Delta x - \Delta t u^2). \end{array} \right. \quad (10)$$

(10)与(6)对比, 格式(10)相当于附加扩散项, 扩散系数为 k_{imp_1} , 显然该附加扩散不能从格式中直接去掉, (10)的数值扩散可写为

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(K_{imp_1} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right).$$

为订正该格式的数值扩散, 引入订正步骤, 定义

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= - \frac{\partial}{\partial t} (u_d \psi), \\ u_d &= \begin{cases} (-K_{imp_1}/\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x}, & \psi > 0, \\ 0, & \psi = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

因此, Smolar 平流格式可以分为二步:

$$\begin{aligned} \psi_i^* &= \psi_i^n - \{F(\psi_i^n, \psi_{i+1}^n, u_{i+\frac{1}{2}}^n) - F(\psi_i^n, \psi_{i-1}^n, u_{i-\frac{1}{2}}^n)\}, \\ \psi_i^{n+1} &= \psi_i^* - \{F(\psi_i^*, \psi_{i+1}^*, \tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^*) - F(\psi_i^*, \psi_{i-1}^*, \tilde{u}_{i-\frac{1}{2}}^*)\}, \end{aligned}$$

式中的“*”号为改进计算精度可增加订正次数。

为了保证计算稳定应满足

$$\max \left(\frac{|u|_{i+\frac{1}{2}} \Delta t}{\Delta x} \right) \leq 1.$$

3 平流方程数值试验

考虑二维情况的平流方程(1), 在常值和均匀旋转风场下, 给定初值分布, 分别采用以上两种不同平流格式, 进行长时间积分, 积分结果与(1)的精确解对比, 测试两种格式的数值扩散, 频散的特征及差别。

二维计算域取 (32×32) 个格点, $\Delta x = \Delta y = 1.0$, 二维均匀旋转风场 $V = \omega \times R$, 角速度 ω 取值为 $\omega = 1.0 \times 10^{-2}$, 矢径 $R = (x - x_p)i + (y - y_p)j$, (x_p, y_p) 是旋转风场的中心位置, 取为 $(15, 15)$ 。

初值 $\psi(x, y, 0)$ 取如下锥形分布:

$$\psi(x, y, 0) = \begin{cases} \psi_A (1 + \cos \frac{\pi r}{4}), & r \leq r_0, \\ 0, & r > r_0. \end{cases}$$

r 为圆锥底半径 $|r| = [(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2]^{1/2}$, (x_0, y_0) 是锥中心位置, 试验中取为

(16, 22), ψ_A 为平流输送量的振幅 (锥高)。

取时间步长 $\Delta t = 2.0$, 旋转风场的周期 (旋转一周的时间) $T = 628$ s, 旋转一周需 314 步。取 $\alpha = |\nu| \Delta t / \Delta s \sim 0.5$, 采用周期边界条件, 计积分 5 个时间周期 (1570 步), 分别输出每个周期的积分结果及图形。

为了对比两种平流格式误差特征的区别, 定义以下有意义的量:

$$\begin{aligned} \text{质量守恒比} \quad R_M &= \sum \psi_{ij}(t) / \sum \psi_{ij}(0), \\ \text{质量分布比} \quad R_D &= \sum \psi_{ij}^2(t) / \sum \psi_{ij}^2(0), \\ \text{位相差} \quad R_\theta &= \theta - 360^\circ, \\ \text{峰值衰减} \quad P_M &= \psi(t) - \psi(0). \end{aligned}$$

式中 $\psi_{ij}(t)$, $\psi_{ij}(0)$ 及 $\psi_M(t)$, $\psi_M(0)$, 分别是积分至 t 时间和初始时间 (i, j) 点上函数值及峰值 (最大振幅值)。平流方程(1)的二维形式当采用以上两种不同格式, 积分 1, 3, 5 个时间周期后的结果对比见图 1 和表 1。

表 1 两种格式, 理想试验积分 5 个时间周期的对比试验结果

格式名	时间积分步数	积分步数	初数函数型	峰值 $\psi_M(0)$	积分至 t (最大值) $\psi_M(t)$	积分至 t (最小值) $\psi_L(t)$	质量守恒比 R_M	质量分布比 R_D	初值中心位置 (x_0, y_0)	积分至 t 中心(峰) (x, y)	位相差
SOM	314	锥	10.0	8.86	0.0	1.0	0.95	(16, 22)	(16, 22)	0	
	942	锥	10.0	8.58	0.0	1.0	0.94	(16, 22)	(16, 22)	0	
	1570	锥	10.0	8.42	0.0	1.0	0.93	(16, 22)	(16, 22)	0	
Smolar	314	锥	10.0	6.11	0.0	0.97	0.63	(16, 22)	(18, 22)	-30	
	942	锥	10.0	3.79	0.0	0.88	0.39	(16, 22)	(19, 21)	-35	
	1570	锥	10.0	2.93	0.0	0.81	0.29	(16, 22)	(19, 20)	-40	

图 1a 和 1b 是采用 SOM 格式的试验结果, 表明长时间积分后, 几乎无数值扩散 ($R_D \sim 1.0$), 无计算频散, 位相差 $D_e \sim 0.0$, 保持质量守恒 ($R_M \sim 1.0$), 函数不变形。峰值衰减小, 无计算负解, 图 1c 和 1d 是 Smolar 格式的计算结果, 对比可见, 该格式仍保持质量守恒 ($R_M \sim 1.0$), 无计算负解, 但是有明显数值扩散 $R_D < 1.0$, 有位相差 (滞后), 变形。

以上对比试验表明两种平流格式具有显著不同的误差特征, 下面将通过实例模拟, 说明具有不同精度的平流格式, 对模式结果会造成多大的差别, 敏感程度如何。

4 实例数值对比试验

模式 EM3 分别采用 SOM 及 Smolar 平流格式, 进行对比数值试验, 模式计算范围包括美国东北部, 加拿大南部及大西洋西侧 (见图 2a)。格距取 $\Delta x = \Delta y = 80$ km, 时间步长 $\Delta t = 150$ s, 总计 30×30 个格点, 边界取 $\partial\psi / \partial n = 0$; 数值试验包括: (1) 为定量估计以上两种平流格式由于其误差特征不同 (这里主要分析数值扩散不同) 在模拟 SO_2 输送过程中给模拟结果带来的影响, 用均匀旋转风场, 给定瞬时点源, 为突出数值扩散的影响, 令 $k_x = k_y = 0$, 模式共积分 70 h, 表 2 给出模式积分 1, 13, 18, 30, 70 h

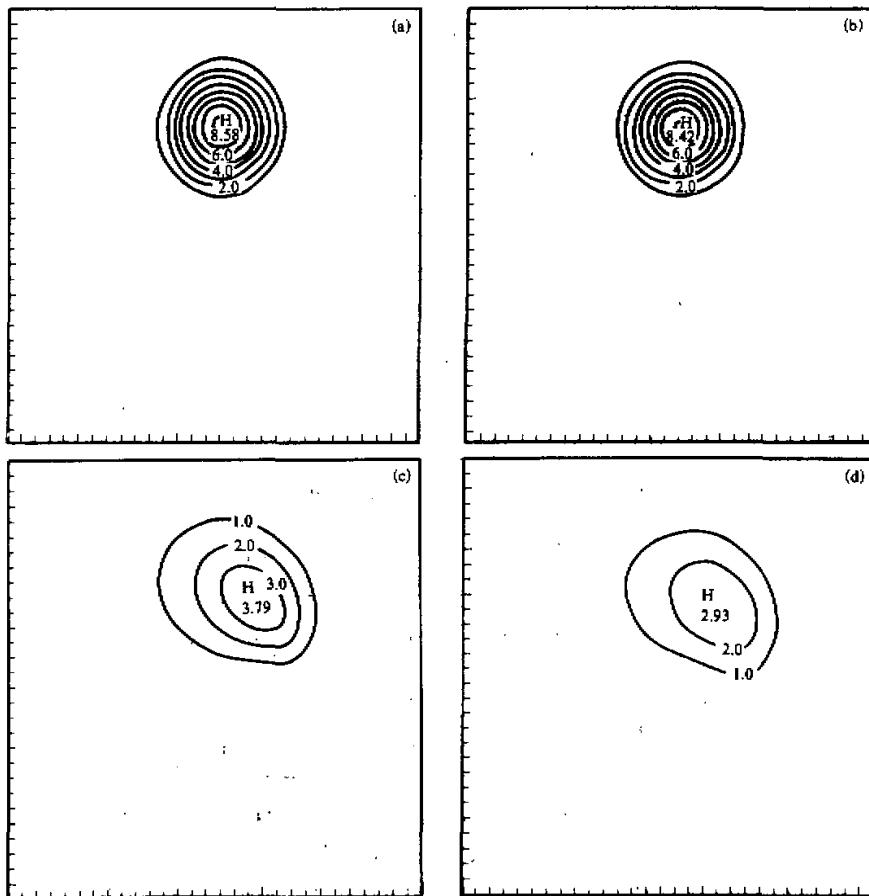


图 1 理想试验, (a)、(b): SOM 格式试验结果; (c)、(d): Smolar 格式试验结果

表 2 模式积分至不同时段中心浓度 C_c ($\times 10^6$), 位相差 D_θ

积分时间 (h)	1		13		18		30		50		70		
	分布 格式	C_c	D_θ										
SOM	0.681	0°	0.310	0°	0.210	0°	0.220	0°	0.25	0°	0.214	0°	
Smolar	0.402	0°	0.083	-40°	0.067	-100°	0.050	-110°	0.033	-120°	0.027	-130°	

物质浓度中心在输送中浓度的变化及位相差, 图 2b 和 2c 给出积分至 30 h 的浓度分布。采用 Smolar 格式, 由于格式的数值扩散, 使 SO_2 的分布在输送中明显向四周扩散, 中心浓度迅速衰减, 水平平移轨迹有误差, 并出现明显的位相滞后($D_\theta < 0$), 在以上两种平流格式模拟结果中, 相对应的浓度中心的浓度比, SOM 格式几乎为 Smolar 格式的 4 倍 (积分 30 小时)。采用 SOM 格式的模拟结果无论是中心浓度值, 移动轨

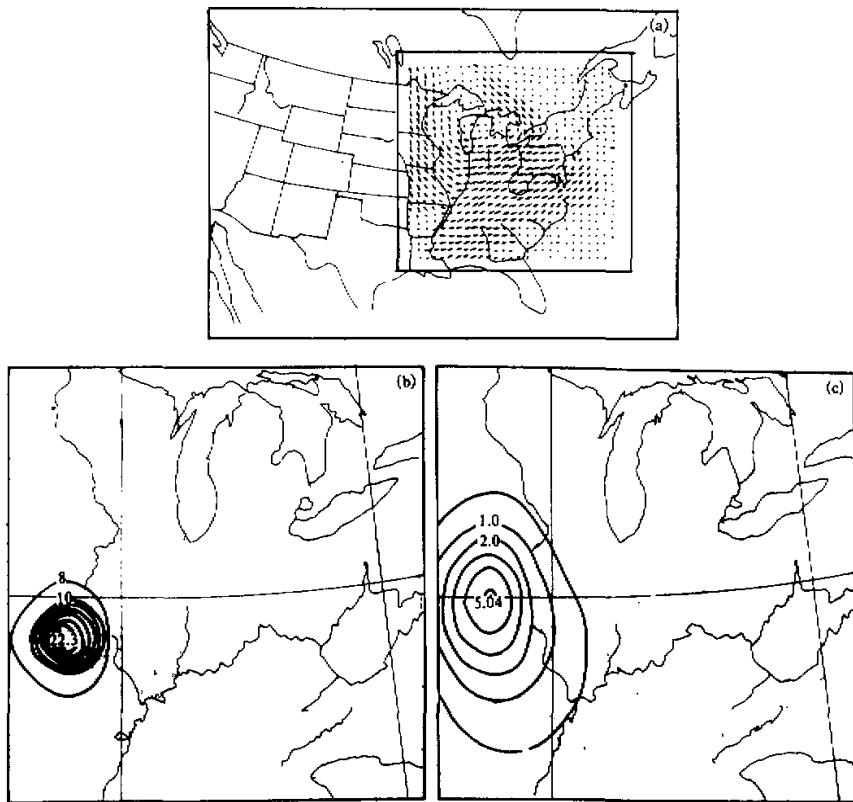


图2 (a) 模式计算范围; (b) 模式采用 SOM 格式积分至 30 小时的浓度分布;
(c) 模式采用 Smolar 格式积分 30 小时的浓度分布

迹, SO_2 的分布形式与精确解对比都几乎完全正确。进一步用积分 30 小时的结果反推算出两种平流格式数值扩散的大小^[4], Smolaar 格式相当于附加近似 $8 \times 10^4 \text{ m}^2 / \text{s}$ 的水平扩散, 而 SOM 格式数值扩散很小, 比前者小一个量级。(2) 由中尺度模式 MM4 提供“实际”风场(图 3a), 其他条件同上, 模式积分 30 小时的结果如图 3b、3c, 浓度分布扩散范围、中心浓度位置, 强度两种格式结果差别很大, 通过理想数值对比试验(第三节及(1))都表明平流格式 SOM 几乎无数值扩散, 输送中浓度分布形式不变形, 中心值衰减和水平位移轨迹十分精确, 这里我们近似与 SOM 格式的模拟结果图 3a 对比说明平流格式的误差对模拟结果的可能歪曲。(3) EM3 模式分别采用以上两种平流格式对美国 OSCAIV^[4]实例进行数值模拟试验, 图 3c、3d 为模式积分 30 小时采用两种格式的结果, 我们以图 3c 近似作为精确结果, 可见 SO_2 浓度分布明显差别, 尤其浓度中心的位置, 强度差别更为显著, 选择 6 个相应的浓度中心对比其浓度, 一般相差 1~2 倍(如表 3), 说明平流格式误差给模拟结果造成影响是很可观的, 进一步的研究表明^[4],

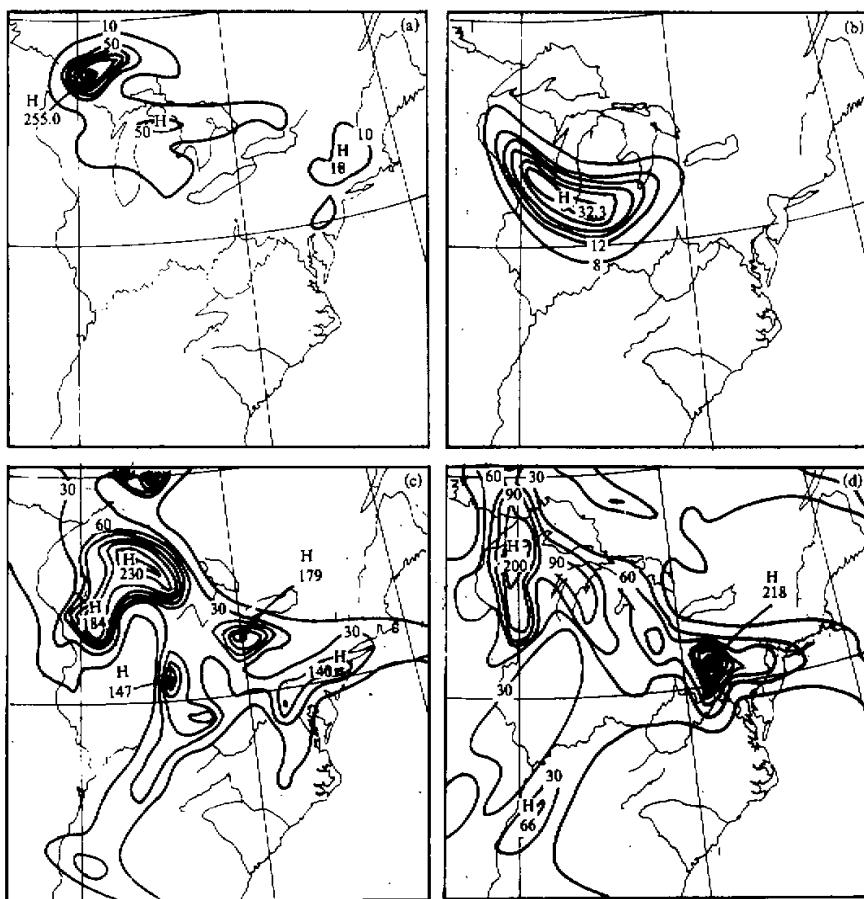


图 3 EM3 模式用 MM4 输出的实例风场作为背景风场, 在理想点源下积分 70 小时, (a) 模式采用 SOM 格式浓度 (SO_2) 分布; (b) 采用 Smolar 格式浓度 (SO_2) 分布; (c) 和(d) 分别为 EM3 模式采用 SOM 格式和 Smolar 格式, 实例风场和实例场值分布下积分 30 小时的浓度 (SO_2) 分布

表 3 实例积分至 30 小时, 模拟结果

格 式 \ 位 置	(22, 10)	(18, 8)	(15, 12)	(18, 16)	(15, 22)
SOM	0.023	0.0184	0.0147	0.0179	0.014
Smolar	0.012	0.0140	0.008	0.010	0.008

这种影响显示了高精度的平流格式使模拟结果的浓度分布型及浓度随高度和时间的变化, 以及浓度中心的水平运动轨迹更趋合理, 说明采用高精度的平流格式明显改进了模拟效果。

5 结语

(1) 两种具有不同数值扩散和计算频散误差特征的平流格式，在理想测试和引入模式后的实例对比数值试验中，所得到的结果表明：平流格式的选择对输送问题模拟结果的影响显著，分析数值模拟所采用的平流格式的误差特征及其对模拟结果的可能歪曲，对分析和改进模式的预测能力是极为重要的。

(2) 物理扩散及平流格式的数值扩散：i)物理扩散是实际大气中一个重要的物理过程，高分辩的观测证明了该扩散对小尺度特征的混合作用^[3]，研究表明正确的模拟大气过程，模式一定要考虑水平扩散过程($K_x \neq 0, K_y \neq 0$)，而且模式只有选用数值扩散尽可能小的平流格式才能更突出实际水平扩散的作用，采用很小数值扩散、频散的 SOM 平流格式，考虑水平扩散取得了理想的模拟结果。ii)数值扩散是平流格式的误差源，而且又是用来减小计算频散，控制计算稳定的必要措施，对此，数值试验也表明了如果要改进模拟效果，数值扩散一定要控制到适当的小，要求平流格式在很小数值扩散特征下是计算稳定的，如果用数值扩散去保证计算稳定性，最好能使数值扩散控制到只起到控制不稳定的作用，SOM 格式很小数值扩散，在满足 CFL 条件下不需要强加扩散能保证计算稳定（在风场具有较强的辐散（或辐合）时该格式有时会出现不合理的输送，并进而出现弱计算不稳定）。Smolar 格式省时，计算稳定并能保证正解，适当调整附加扩散能使数值扩散得到合理的控制。

(3) 平流格式由于截断误差造成的数值扩散长期以来是研究工作关心的问题，SOM 格式高精度，很小数值扩散，但是它要求的计算时间及内存都远远超过 Smolar 格式，这给其投入业务使用带来困难，研制在计算稳定性、精确性及实用性都合适的计算格式正是目前正在研究的工作。

参 考 文 献

- 1 Prather M. J., 1986, Numerical advection by conservation of second-order moments, *J. Geophys. Res.*, 91(D6), 6671~6681.
- 2 Smolarkiewicz, P. K., 1983, A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion, *Mon. Wea. Rev.*, 111, 479~486.
- 3 Lei Xiaoen and J. S. Chang, 1992, A high resolution model for species exchange within the troposphere, *Acta Meteorologica Sinica*, 6, 479~490.
- 4 Lei Xiaoen and Ge Xiaozhen, 1992, Influence of horizontal diffusion on species transfer in regional range, Annual Report of LASG, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, 217~231.
- 5 Nastrom, G.D., W.H. Jasperson and K. S. Gage, 1986, Horizontal spectra of atmospheric tracers measured during the global atmospheric sampling program, *J. Geophys. Res.*, 91, 13201~13209.

Comparison of Various Transfer Schemes in a High Resolution Regional Model

Ge Xiaozhen

J.S. Chang

(Department of Atmospheric Sciences, University, Nanjing 210093) (ASRC., SUNY., Albany, NY 12205 USA)

Lei Xiaoen

(Institute Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029)

Abstract Based on theoretic tests of the two transfer schemes, this paper describes a 19-layer high resolution regional transfer model EM3, and an example transfer wind field supplied by the mesoscale model (MM4), integration to 13, 18, 30, 50, 70 hours, for analytical and comparative numerical test. The two schemes are two-order momentum matrix conservation scheme (simplified as SOM) and Smolark scheme, respectively. The numerical results show that the numerical diffusion reduces by an order of magnitude; the central density of transfer material (SO_2) differs by a factor of one to two. The simulation accuracy for the central density horizontal mean move-track is significantly improved. The selection of high accurate advection scheme is an important way to improve the model results.

Key words transfer scheme numerical diffusion computation dispersion