大气扩散的数值计算

桑建国　温市耕　编著

气象出版社

大气扩散的数值计算

桑建国　温市耕　编著

气象出版社

(京)新登字046号

内 容 简 介

采用数值方法计算大气中污染物的传输扩散，是当前国内外空气污染气象学的发展趋势。本书综合了国内外近十几年来在这方面的研究成果，系统地讲述数值方法在大气污染物输送扩散过程计算中的应用，包括大气边界层各种物理通量计算的参数化方法，城市、山区、沿海等各类地形上空气污染物输送模式等，并附有简明的计算程序。可供空气污染气象学、大气物理学、大气环境科学、大气边界层物理学等学科的科技工作者参考。

大气扩散的数值计算

桑建国　温市耕　编著

责任编辑：徐　昭

*　　*　　*

气象出版社 出版

（北京西郊白石桥路46号）

新华书店总店科技发行所发行　全国各地新华书店经销

北京市顺义兴华印刷厂印刷

开本：787×1092　1/32　印张：11.875　字数：265千字

1992年4月第一版　1992年4月第一次印刷

印数：1—1200　定价：9.15元

ISBN 7-5029-0817-X/X·0008

前　言

本书是在同名讲义的基础上改编而成的。这本讲义在北京大学地球物理系和环境科学中心的大气物理、大气环境专业做为研究生课讲授多年，并有幸在几个省市的气象、环保部门和兄弟院校的大气环境专业做过介绍。

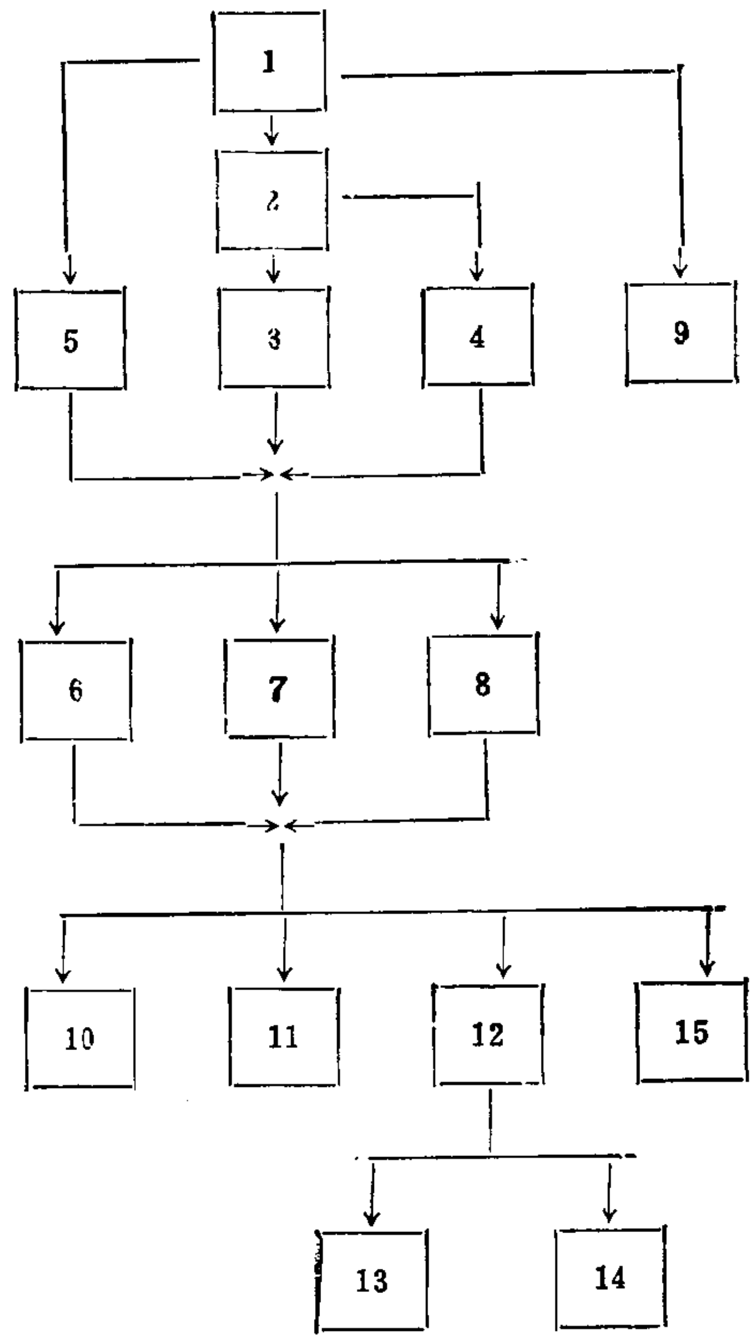
本书的主要内容是介绍大气边界层中风场、温度场、湍流通量及污染物传输扩散的计算方法，可供从事大气环境、大气物理和边界层物理的科技人员和大专院校有关专业师生参考。

在大气污染物传输扩散计算中常用的正态模式方法以及相应的扩散参数的求法，在我国已有多种专著[1,2]、译著[3]和文献报告[4,5]做过详尽介绍，因此本书没有再包含这部分内容，这并不反映作者在方法选择上的倾向。

本书着重介绍计算方法，假定读者已具备一定边界层物理的基础知识。对本书理论论述上感到不满足的读者可参考有关大气边界层和大气湍流的专著[6-10]。

由于讲义编写时期的限制，本书所收集的文献截至1989年，而主要内容都属于80年代中期以前的研究工作成果。因此作者建议读者在阅读本书的同时，注意最近几年的新进展。

阅读本书各章时，建议采取以下顺序：



其中在同一排中的各章相互独立，不受阅读顺序影响。

目　　录

第一章　平流扩散方程的建立和求解

研究污染物在大气中的输送过程有两种基本方法：梯度输送理论和统计理论。统计理论的研究方法是追踪个别空气微团的运动，因而属于拉格朗日方法。梯度输送理论的研究方法则是欧拉的，它讨论在空间固定点上由于大气湍流运动而引起的质量(污染物浓度)通量。根据梯度输送理论，湍流的通量正比于该固定点上的浓度梯度，其比例系数称为湍流扩散系数，用符号 K 表示，因而梯度输送理论又被称为 K 理论。应用 K 理论使平均浓度的连续方程得到闭合，从而得到了污染物浓度的平流扩散方程。我们将会看到，空气污染物输送问题的数值模拟中，大部分课题都是围绕平流扩散方程的求解而展开的。

§1　梯度输送理论和平均浓度守恒方程

考虑有M种污染物成份，每种成份的浓度 $c_i(x,y,z,t)$在大气中都必须满足守恒方程

$$\frac{\partial c_i}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(uc_i)+\frac{\partial}{\partial y}(vc_i)+\frac{\partial}{\partial t}(wc_i)=$$

$$D_i\left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2}\right)+R_i(c_1,c_2,\cdots,c_i,\cdots,c_N,T)$$

$$+S_i(x,y,z,t)\quad i=1,2,\cdots,N \tag{1.1}$$

其中 D_i 为第 i 种成份的分子扩散系数，R_i 为第 i 种成份的化学反应生成率，S_i 为排放源强度。一般包括化学反应的流体动力学问题中，为求解 c_i 必须同时求解速度 u,v,w 和温度 T 等变量，即解包括质量、动量和能量的方程组，但是如果假定污染物诸成份对气象条件并不产生显著作用，我们可以认为连续方程(1.1)独立于Navier-Stokes 方程和能量方程。

考虑到大气的湍流性质，风速可假定为平均量和扰动量之和，例如 $u=\langle u\rangle+u'$，其中$\langle u\rangle$为时间平均。分子扩散作用在大气中相当小可以略去。上述关系代入到方程(1.1)中，得到平均浓度 $\bar{c}_i$ 的方程，

$$\frac{\partial\bar{c}_i}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\langle u\rangle\bar{c}_i)+\frac{\partial}{\partial y}(\langle v\rangle\bar{c}_i)+\frac{\partial}{\partial z}(\langle w\rangle\bar{c}_i)$$
$$+\frac{\partial}{\partial x}\overline{u'c_i'}+\frac{\partial}{\partial y}\overline{v'c_i'}+\frac{\partial}{\partial z}\overline{w'c_i'}$$
$$=\overline{R_i(\bar{c}_1+c_1',\bar{c}_2+c_2',\cdots,\bar{c}_N+c_N')}$$
$$+S_i(x,y,z,t) \tag{1.2}$$

其中 $c_i=\bar{c}_i+c_i'$，$\overline{c_i'}=0$，$\bar{c}_i$ 为浓度的总体平均值。在方程(1.2)中，由于出现了新的变量$\overline{u'c_i'}$，$\overline{v'c_i'}$，$\overline{w'c_i'}$以及 R_i 中可能出现的$\overline{c_i'c_j'}$，使利用这个方程求解 $\bar{c}_i$ 遇到了新的困难。为了求解而又不增加方程的个数，就必须把这些量用已知量表达出来。为达到这个目的，最通行的办法就是利用梯度输送理论。这个理论假定

$$\overline{u'c_i'}=-K_{xx}\frac{\partial\bar{c}_i}{\partial x}$$
$$\overline{v'c_i'}=-K_{yy}\frac{\partial\bar{c}_i}{\partial y} \tag{1.3}$$
$$\overline{w'c_i'}=-K_{zz}\frac{\partial\bar{c}_i}{\partial z}$$

其中 K_{xx}, K_{yy}, K_{zz} 是二阶张量 $\mathbf{K}$ 的分量，

$$\mathbf{K}=\begin{bmatrix} K_{xx} & K_{yx} & K_{zx} \\ K_{xy} & K_{yy} & K_{zy} \\ K_{xz} & K_{yz} & K_{zz} \end{bmatrix}$$

其中非对角线分量皆为零。如果假定湍流场是水平均匀的，则有

$$K_{xx}=K_{yy}=K_H,$$

另外令 $$K_{zz}=K_V$$

由于没有充分的理论根据和实验资料说明量 $\overline{c_i'c_j'}$ 的性质和作用，我们只能假定(1.2)中化学反应生成率的平均就近似等于平均浓度的化学反应生成率，即

$$\overline{R_i(\bar{c}_1+c_1',\cdots,\bar{c}_N+c_N',T)} = R_i(\bar{c}_1,\bar{c}_2,\cdots,\bar{c}_N,T)$$

代入方程(1.2)中，得到

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\langle u\rangle \bar{c}_i)+\frac{\partial}{\partial y}(\langle v\rangle \bar{c}_i)+\frac{\partial}{\partial z}(\langle w\rangle \bar{c}_i) = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_H\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_H\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_V\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z}\right) + R_i(\bar{c}_1,\cdots,\bar{c}_N,T)+S_i(x,y,z,t) \tag{1.4}$$

这就是平均浓度 $\bar{c}_i$ 的平流扩散方程。今后为书写方便起见，经常略去 $\langle u\rangle,\langle v\rangle,\langle w\rangle$ 中的 $\langle\ \ \rangle$ 号，和平均浓度 $\bar{c}_i$ 中的 $^-$ 号，得到的表达式为

$$\frac{\partial c_i}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(uc_i)+\frac{\partial}{\partial y}(vc_i)+\frac{\partial}{\partial z}(wc_i) = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_H\frac{\partial c_i}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_H\frac{\partial c_i}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_V\frac{\partial c_i}{\partial z}\right) + R_i(c_1,\cdots,c_N,T)+S_i(x,y,z,t) \tag{1.5}$$

于是污染物 c_i 的扩散问题就变为在一定边条件和源强下求解方程(1.5)的问题。

§ 2 平流扩散方程的解析解

在方程(1.5)中，风速 (u,v,w) 和扩散系数 (K_H,K_V) 都是气象场或气象场的函数，它们都随空间和时间而变化。在实际问题中，排放源的位置、强度及其时间演变都无法用数学上的显函数形式表达出来。另外，化学反应项可能是非线性的。因此通常情况下方程(1.5)很难得出解析解，而只能采用数值方法求解。数值解不象正态模式那样有明显的物理上的解释，而且数值解的数值和方程中各参数之间的关系也不那么一目了然。因而在各种简化条件下寻求解析解，至今仍然是有意义的，它有助于我们理解方程中各物理参数在浓度空间分布中的作用，对求数值解的过程也有一定程度的启发和指导作用。

在平稳定常状态下，湍流切变气流中高架点源排放出的污染物应遵循扩散方程

$$u\frac{\partial c}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial y}\left(K_H\frac{\partial c}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_V\frac{\partial c}{\partial z}\right)+S \qquad (1.6)$$

其中 x 轴取成沿平均气流的方向，略去了沿气流方向上的扩散作用，流场和排放源强度都不随时间变化。

$$S=Q\delta(x)\delta(y)\delta(z-z_S) \qquad (1.7)$$

表示一个位于 $(0,0,z_S)$ 处强度为 Q 的源。

$$u(z)=az^p \qquad (1.8)$$

$$K_V(z)=bz^n \qquad (1.9)$$

根据 Batchelor[11]，横向扩散系数 K_H 可以表示成

$$K_H = K_Y = \frac{1}{2}\frac{d\sigma_y^2}{dt} \qquad \text{或者}$$

$$K_H = \frac{1}{2} u \frac{d\sigma_y^2}{dx} \tag{1.10}$$

其中 σ_y 为污染物质横向分布的标准差。

方程(1.6)在条件(1.7),(1.8),(1.9)和(1.10)下的解析解为[12],

$$c = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_y}\exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]\frac{[zz_S]^{(1-n)/2}}{bax}$$

$$\exp\left[-\frac{a(z^\alpha + z_S^\alpha)}{ba^2x}\right]$$

$$I_{-\nu}\left[\frac{2a(zz_S)^{\alpha/2}}{ba^2x}\right] \tag{1.11}$$

其中 $\alpha = 2 + p - n$, $\nu = (1-n)/\alpha$, $I_{-\nu}$ 是阶数为 $-\nu$ 的第一类变型贝塞尔函数。对于狄利克莱边条件,方程(1.11)中的 $I_{-\nu}$ 应由 I_ν 代替。(1.11)中的参数 a, b, n 和 p 决定于大气稳定度和地面粗糙度。下面讨论几种特定情况下(1.11)式解的形式。

1. 正态分布

如果风速和扩散系数都不随高度变化,则有

$$p = n = 0\,, \qquad \nu = \frac{1}{2}$$

在平稳均匀的湍流场中,位于$(0,0,H)$的源所形成的浓度场,可由解(1.11)得到

$$c = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z u}\exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]\left\{\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{Z+H}{\sigma_z}\right)^2\right]\right\} \tag{1.12}$$

这和由湍流统计理论得到的典型正态分布是一致的。

2. 地面点源

对于位于(0,0,0)的地面点源，方程(1.6)的解为

$$c=c_g e^{-z^\alpha/B} \tag{1.13}$$

其中

$$c_g=\frac{QA(\alpha,\beta)}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_y x^\beta}\exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)$$

$$A(\alpha,\beta)=\frac{\alpha}{a^\gamma(b\alpha^2)^\beta\Gamma(\beta)}$$

$$\beta=\frac{1+p}{\alpha},\qquad B=\frac{b}{a}\alpha^2 x$$

方程(1.13)表明，地面源排放的污染物随高度成负指数分布。一般地 $\alpha\neq2$，因而不是正态分布。由美国大草原计划等实测结果看，$1<\alpha<2$。

式(1.13)中的 B 和 α 决定于大气稳定度和地表粗糙度，如果设 $p=n$，则

$$B=4\frac{K_V}{u}x=2\sigma_z^2$$

方程(1.13)化为

$$c=c_g e^{-z^2/2\sigma_z^2}$$

和 Sutton[13] 和 Pasquill[14]给出的扩散公式一样。

3. 无限长的横风线源

如果将方程(1.11)沿 y 方向积分，就得到连续线源的模式

$$c=\frac{Q(zz_S)^{(1-n)/2}}{b\alpha x}\exp\left(-\frac{z^\alpha+z_S{}^\alpha}{B}\right)\cdot I_{-\nu}\left[\frac{2(zz_S)^{\alpha/2}}{B}\right] \tag{1.14}$$

对于地面源

$$c = c_g e^{-z^{\alpha}/\beta} \tag{1.15}$$

其中 $c_g = \dfrac{QA(\alpha,\beta)}{x^{\beta}}$。式(1.15)和 Roberts[15]在1923年得到的解是一样的。

从上面几个例子可以看出，解析解所要求的条件是很苛刻的，通常的大气状态下都无法满足。因此对于平流扩散方程(1.5)的普遍求解方法是数值积分方法，这将是本书以后各章所要讨论的主要课题。

第二章 数值解法

在这一章中，我们将以一维平流扩散方程为例，讨论数值解的计算方法。以后我们会看到，这些基本方法容易推广到二维和三维情形中去。

下面讨论如何通过一维平流扩散方程

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u\frac{\partial c}{\partial x} + K\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \qquad (2.1)$$

求解在 x 轴上线段 AB 间的浓度分布。在数值解法中实际上是把 AB 分成有限个区域——网格，在网格点上求浓度的数值解。具体解法是：从 $t=0$ 开始，先给出浓度在各网格点上的初始值 c_i^0，然后计算(2.1)式中右端两项，给出初始时刻各格点上的$\left.\frac{\partial c_i}{\partial t}\right|_{t=0}$。下一时刻，$t=\Delta t$ 的浓度 c_i^1，则为 $c_i^1 = c_i^0 + \Delta t \times \left.\frac{\partial c_i}{\partial t}\right|_{t=0}$。按这种方法依次向前推进，可以求得任意时刻的浓度分布。图 2.1 给出了这个解题步骤的流程。在本章和下一章中，浓度符号 c_i 中的下标 i 表示差分格式中的第 i 个格点，应注意和上一章表示方法的不同。在上一章中，c_i 的下标 i 表示第 i 种污染物成分。这两种用法不会同时出现，相信不致引起含义上的混乱。

上面计算的关键是如何把方程(2.1)中的浓度局地变化项、平流项和扩散项用有限差分格式表示出来。这将是我们在 §1 中要讨论的问题。

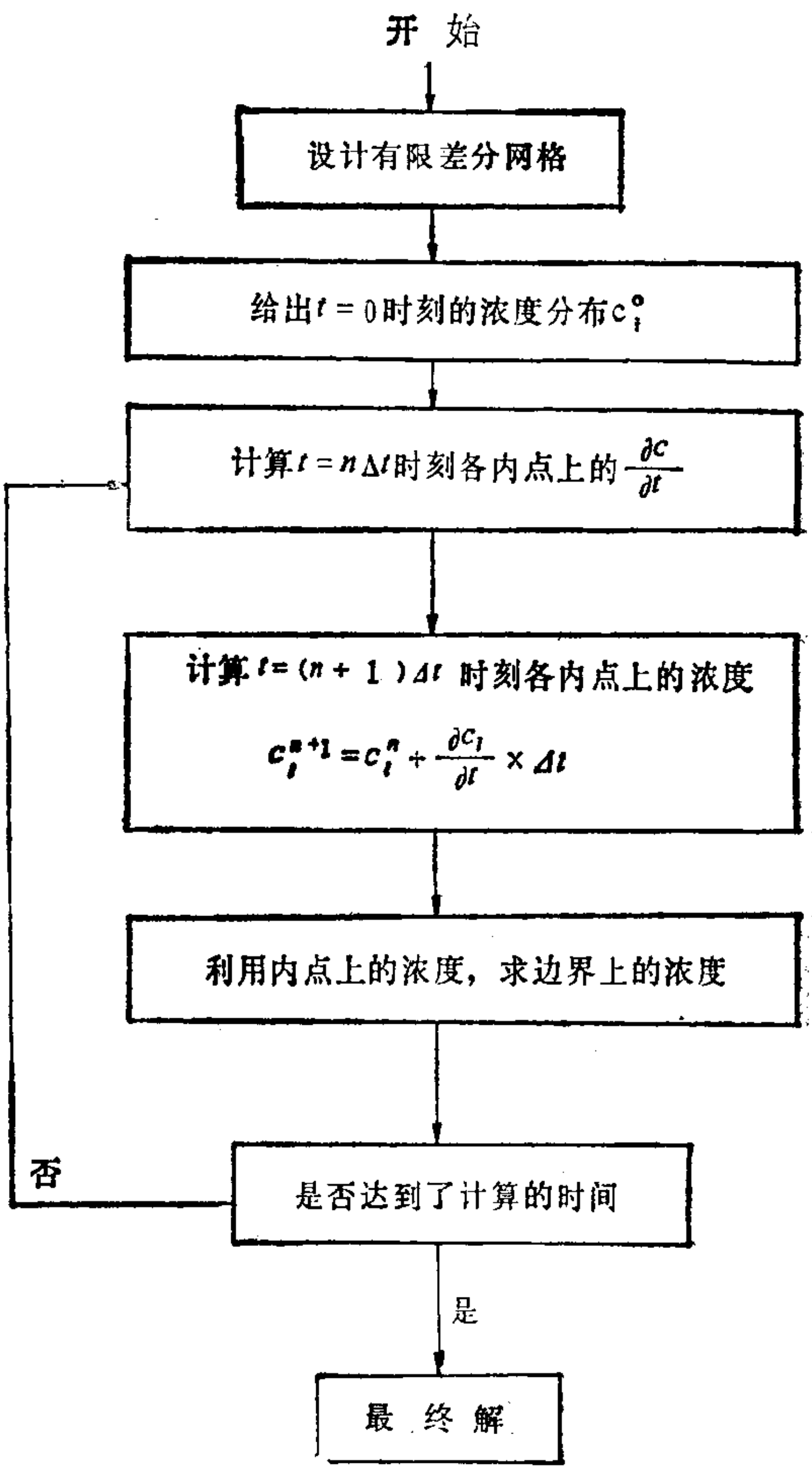


图2.1 数值解的计算流程