一种基于对流扩散方程的有风烟尘扩散数值模拟方法

郑滕飞 022 PB20000296
何忻芸 041 PB20010407
黄弈骁 014 PB20000131

2023 年 5 月 28 日

目录

摘要

针对工厂烟囱排放的灰尘扩散问题，本文基于微分方程的大气扩散数学模型，建立一个能够模拟灰尘浓度分布特征的模型，用于确定工厂周围地表灰尘浓度。该模型考虑了烟囱排放的灰尘量、风速和地形等因素，并使用了数值方法进行求解。考虑到简捷性，在模型建立中对现实条件进行适当简化：

(1) 灰尘排放：设定为烟囱点源排放，单位时间内排放的灰尘质量 Q 保持不变；

(2) 灰尘扩散：灰尘本身不发生分解、衰变等变化，满足质量守恒；

(3) 外界条件：气温、大气稳定，风的平均流场稳定、风速 U 恒定、风向固定且平直；地势不对风场产生影响；

通过各种数值方法对模型的计算求解后，我们得到了不同条件下的灰尘浓度分布情况，为工厂的环境保护提供了参考。

Abstract

Aiming at the problem of dust dispersion emitted by factory chimneys, this paper establishes a model that can simulate the distribution characteristics of dust concentration based on the mathematical model of atmospheric dispersion based on differential equations, and is used to determine the dust concentration on the surface around the factory. The model takes into account factors such as the amount of dust emitted from the chimney, wind speed, and terrain, and uses numerical methods to solve for it. Taking into account the simplicity, the realistic conditions are appropriately simplified in the model building:

(1) Dust emission: set as chimney point source emission, the mass of dust emitted per unit time Q remains unchanged;

(2) Dust diffusion: the dust itself does not undergo decomposition, decay and other changes, which meets the conservation of quality;

(3) External conditions: air temperature, stable atmosphere, stable average flow field of wind, constant wind speed U constant, fixed and straight wind direction; The terrain is flat and does not affect the wind field;

Calculating the model by several numerical methods, we can obtain the dust concentration distribution under different conditions, which provides a reference for the environmental protection of the factory.

一、 前言

随着工业化的发展，工厂生产对环境污染成为了人们生活上的困扰。我国许多城市的生活区内大烟囱林立，排放的灰尘浓烟对人体健康和环境造成了潜在的危害。因此，对于工厂烟囱周边地表灰尘扩散浓度的研究具有重要的现实意义。

本文旨在针对目前的排放问题，通过建立模型，对工厂烟囱排放的灰尘在周围环境扩散分布浓度等进行模拟评估，研究工厂排放污染的扩散规律，估计工厂更利于居民健康的建设地点，为相关部门提供科学的决策依据，以保障人民健康和环境的安全。我们将通过以下几个方面来实现研究目的：

1. 分析工厂烟囱周边地表灰尘扩散的影响因素，包括气象条件、地形地貌、工厂烟囱高度、烟囱排放速率等；
2. 建立数学模型，描述灰尘扩散的过程，并考虑上述影响因素的作用；
3. 考察对模型求解的各种数值条件与方式，确定求解方法；
4. 通过数值模拟，模拟不同气象条件、地形地貌、工厂烟囱高度、烟囱排放速率等情况下的灰尘扩散浓度分布情况；
5. 对模拟结果进行分析和评价，探讨工厂烟囱周边地表灰尘扩散的规律，并提出相应的控制措施和建议。

二、 相关工作

§2.1 研究背景

1932 年，微气象学家 Sutton 提出描述大气扩散过程的高斯方程，首次通过野外试验参数推算了大气污染物的扩散状况。

20 世纪 70 年代，随着有限元法、有限差分法、有限体积法等近似计算方法的发展，基于流体力学、数值计算方法以及计算机图形学建立的流体动力学方法形成，基于 Navier-Stokes 方程的三维流体力学模型预测方法得以建立，大气扩散模拟的精度得到大幅度提升，模拟过程也更为便捷。

目前国内常用的大气污染扩散模型主要有：以高斯理论为基础、以拉格朗日方法为基础的模型，采用 Navier-Stokes 方程和扩散方程的偏微分方程模型，等。

§2.2 高斯扩散模型

以高斯理论为基础的扩散模式 [1–3] 以烟囱排放点作为原点，平均风向为 x 轴正方向，烟囱垂直于地表水平面朝上为 z 轴正方向，建立右手坐标系 $Oxyz$，并做如下假设：

1. 烟囱排放的灰尘浓度在 y, z 轴向上的分布符合正态分布；
2. 在全空间内风速均匀；
3. 排放源强连续均匀；
4. 在扩散过程中灰尘符合质量守恒。

2.2.1 无界空间连续点源扩散的高斯模型

对于下风向任意一点 (x, y, z) ，灰尘浓度为：

$$C(x,y,z) = A(x)e^{-ay^2}e^{-bz^2} \tag{2.1}$$

定义在 y, z 方向的方差为扩散参数 σ_y, σ_z，它们与大气稳定程度有关，由于风的存在，它们随 x 增加而增加，且由等式：

$$\sigma_y^2 = \frac{\int_0^\infty y^2 \, \mathrm{d}y}{\int_0^\infty C \, \mathrm{d}y}, \quad \sigma_z^2 = \frac{\int_0^\infty z^2 \, \mathrm{d}z}{\int_0^\infty C \, \mathrm{d}z} \tag{2.2}$$

反解得到：

$$a = \frac{1}{2\sigma_y^2}, \quad b = \frac{1}{2\sigma_z^2} \tag{2.3}$$

根据质量守恒，源强：

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} UC \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z \tag{2.4}$$

其中，U 为风速，Q 为单位时间的排放质量。
将式 (2.1)、式 (2.3) 带入式 (2.4) 得：

$$A(x) = \frac{Q}{2\pi U \sigma_y \sigma_z} \tag{2.5}$$

最后整理得到无界空间连续点源扩散的高斯模型：

$$C(x,y,z) = \frac{Q}{2\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right)\right] \tag{2.6}$$

2.2.2 高架连续点源扩散的地表浓度

这里考虑烟囱 (高架) 高度为 h ，并假设地面对灰尘起全反射作用。
那么类似 **2.2.1** 分析，对于下风向的点 (x, y, z) ，灰尘浓度：

$$C(x,y,z) = C_1 + C_2 \tag{2.7}$$

其中

$$C_1 = \frac{Q}{2\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right)\right]$$

是排放点源 $(0,0,h)$ 提供的浓度；

$$C_2 = \frac{Q}{2\pi U\sigma_y\sigma_z}\exp\left[-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2}+\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right)\right]$$

是全反射像源 $(0,0,-h)$ 提供的浓度。

计算地面灰尘浓度即令 $z=0$ ，得到高架连续点源扩散的地表浓度模型：

$$\begin{aligned} C(x,y,0) &= \frac{Q}{2\pi U\sigma_y\sigma_z}\exp\left[-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2}+\frac{(-h)^2}{2\sigma_z^2}\right)\right]+\frac{Q}{2\pi U\sigma_y\sigma_z}\exp\left[-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2}+\frac{h^2}{2\sigma_z^2}\right)\right] \\ &= \frac{Q}{\pi U\sigma_y\sigma_z}\exp\left[-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2}+\frac{h^2}{2\sigma_z^2}\right)\right] \end{aligned} \tag{2.8}$$

若要计算地面最大浓度，即求:

$$\max_x C(x,0,0) = \frac{Q}{\pi U\sigma_y\sigma_z}\exp\left(-\frac{h^2}{2\sigma_z^2}\right) \tag{2.9}$$

为简化计算不妨令 σ_y/σ_z 为常数 S ，在式 (2.8) 中令：

$$\frac{\mathrm{d}C(x,0,0)}{\mathrm{d}x} = 0 \tag{2.10}$$

求解式 (2.9) 得到：

$$C_{max} = \frac{2QS}{\pi U h^2 e} \tag{2.11}$$

§2.3 拉格朗日扩散模型

拉格朗日大气扩散模型可以细分为两类 [4]：拉格朗日粒子模型与拉格朗日烟团模型。

2.3.1 拉格朗日粒子模型

该模型是基于湍流统计理论得到的扩散模型，可以细致追踪到每一个粒子在大气中的运动状态，计算其时间、空间概率分布情况，以估算出灰尘浓度变化 [5]。

粒子模型将粒子速度视为风场平均速度与湍流速度之和：

$$V = \overline{V} + V' \tag{2.12}$$

而湍流速度矢量满足：

$$V'(t+\Delta t) = V'(t)R_L(\Delta t)+\rho \tag{2.13}$$

其中，t 为时间；Δt 为时间步长；R_L 为拉格朗日自相关系数；ρ 为蒙特卡洛分量。

在实际计算中，粒子模型将带预测区域划分为若干个网络，通过记录第 i 个粒子在第 n 个网络中的停留时间 T_{ni} ，算出第 n 个网络中灰尘的浓度：

$$C_n(x,y,z) = \frac{Q\sum_{i=1}^{N}T_{ni}}{N\Delta x\Delta y\Delta z} \tag{2.14}$$

其中，Q 为源强；N 为灰尘粒子总数；$\Delta x, \Delta y,\ \Delta z$ 分别为 x,y,z 方向上的网格分辨率。

2.3.2 拉格朗日烟团模型

该模型将同一种类的不同烟尘粒子合并为烟团，将烟尘视为有限个烟团的叠加。假设烟团的浓度分布在水平与垂直方向上均满足高斯分布，利用 **2.2** 中的分析，第 i 个烟团对空间内任一点 (r,z) 的浓度作用：

$$C_i(r,z)=\frac{Q_i}{(2\pi)^{3/2}\sigma_r\sigma_z}\exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_r^2}\right)\exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right) \tag{2.15}$$

其中，Q_i 为改烟团的质量；r 为距离点源的水平距离；z 为距离点源的垂直距离。

注意到空间任一点会受多个烟团的影响，且空间内排放源是连续不断的，故该点的浓度为所有的浓度贡献之和：

$$C(r,z)=\sum_{i=1}^{M}C_i(r,z) \tag{2.16}$$

对各个烟团的浓度分布进行模拟或经验求解后，通过简单叠加即可实现对整体的求解。

§2.4 常见模型的分析

高斯模型是基于简化假设而建立的统计学模型，其优点在于其简单易用，适用于大气污染物浓度分布较为均匀的情况。但是，该模型忽略了地形、建筑物等因素对大气扩散的影响，在某些场景下，如建筑密集区域、狭长山谷等地方，衍射和折射现象十分重要，而高斯模型缺乏对这些现象的解释，因此得到的浓度分布精度很低；同时高斯模型通常不适用于时间尺度较短、风速变化的情况，在这种情况下，必须使用微分方程模型来计算污染物扩散过程。

而拉格朗日粒子模型可模拟非稳态、复杂大气流场下污染物的扩散过程，并能有效考虑污染物在大气中传输、湍流等因素对扩散的影响，对污染物浓度分布结果准确性更高。但是由于其模拟了每个粒子的运动过程，计算中需耗费大量的计算资源和时间，参数比较繁多，使用不太方便，适用范围较窄，主要应用于小尺寸场景的污染扩散预测与评估。

拉格朗日烟尘模型将两者的优点结合，但仍然避免不了先验假设浓度在特定方向形成了正态分布稳态，只要考虑地形因素，这个假设往往无法成立。

于是，我们希望能得到一个介于这两者间的模型，既不预先假设整体浓度分布，也不细致到每个粒子，而是将浓度作为整体，考虑烟尘浓度的传输。

三、 问题分析

本文考虑一个高度为 h 的烟囱单位时间排放质量 Q 的灰尘在风速为 U 的西风作用下在周围地表的扩散过程。我们需要建立一个数学模型来描述灰尘的扩散过程，并且通过实验验证模型的有效性。具体来说，除了已知条件以外，我们需要在求解浓度变化前先回答以下问题：

1. 烟囱排放的灰尘有怎样的性质？
2. 烟囱排放的灰尘如何在风的作用下扩散？
3. 如何验证模型的有效性？

§3.1 建模假设

3.1.1 灰尘性质

现实中，工厂排放的烟尘可以看作很多种不同颗粒，每种具有各异的扩散系数、质量与表面积。扩散系数会影响扩散的速度，质量与表面积则是会影响重力与风力的作用。

为方便计算，假设烟尘颗粒相对空气足够稀薄，它们的碰撞与相互作用可以忽略不计。于是，最终的结果也可以看作每种颗粒分别独立叠加，进而只需要对特定的某种粒子考察即可。此后不妨假设灰尘颗粒是均匀的，且其需要满足在扩散过程中质量守恒的基本要求。

此外，由于无法确定工厂具体的排放情况，假定每个时刻排出的烟尘是完全一致的，且排出时的速度可以忽略。

3.1.2 迎风扩散

由已知条件，我们假定风速 U 恒定，地势对风场的影响较小。在忽略了灰尘颗粒的相互作用后，灰尘在空气中的浓度分布由四个条件决定：沿 x 轴正方向的风力作用、z 轴方向的重力与空气浮力复合作用、颗粒在空气中的扩散作用、边界处的情况。

这其中，风力 U 是给定的常数，扩散系数 D 也可通过实验测量，由于粒子均匀，视为常数。因此，后文对模型应用的讨论主要侧重于重力的影响和边界的不同情况。

3.1.3 有效性验证

由于我们的模型只是对单一烟尘考虑，而实际情况有各种复杂的经验公式，我们无法直接通过测量的数据进行结果验证。

不过，我们可以将方程模拟结果与前述的高斯模型结果进行对比，并考察不同地形对结果影响的适用性，进而验证模型的有效性。

§3.2 符号说明

由于实际问题中的物理量都是存在量纲的，为了方便数学求解，需要进行无量纲化。例如，排放强度 Q 的大小差别仅在于每点浓度乘常数倍，不影响分布，可设为 1 或其他值；而对 z 坐标进行 $\tilde{z} = z/h$ 的无量纲化后，则可设 $h = 1$（在对不同高度的效果进行对比时可以在 1 附近调整）。其他量以各自单位基准进行无量纲化后，即可以进行数学上的建模。

为方便讨论，我们的模型中采用以下的符号：

表 1: **符号说明**

符号	说明	单位
h	烟囱 (排放点) 高度	**m**
Q	单位时间内排放的灰尘质量	**kg/s**
U	风速	**m/s**
D	扩散系数	$\mathbf{m^2/s}$
(x, y)	地表位置坐标，烟囱为原点 $(0, 0)$, 西风吹向为 x 正方向	**(m,m)**
z	垂直地表高度	**m**
t	扩散时间	**s**
$C(A, t)$	灰尘浓度，表示空间点 A，时间为 t 时的灰尘浓度	$\mathbf{kg/(m^3 \cdot s)}$
$s(x, y)$	地面高度，表示 (x, y) 处地面的 z 坐标	**m**

四、 模型建立

§4.1 对流-扩散方程

由流体力学，扩散作用项的表达是 $D\Delta C$，其中

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

是拉普拉斯算子。

而由空气运动所产生的对流项的表达是 $\mathbf{u} \cdot \nabla C$，其中 $\mathbf{u}(x, y, z, t)$ 为流速，

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

为 Nabla 算子。

由于 x 方向风速恒定，其余只有 z 方向速度，可化简为得到以下偏微分方程：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = U\frac{\partial C}{\partial x} + w(z, t)\frac{\partial C}{\partial z} + D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) + C_0(x, y, z) \tag{4.1}$$

式 (4.1) 是一个对流-扩散方程，对其有多种不同的数值求解策略 [6]。

根据流体力学推导，扩散系数 D 可以表示为 $\frac{kT}{6\pi\eta r}$，其中 k 是玻尔兹曼常数，T 是温度，η 是空气粘度，r 是灰尘粒子半径，这里可不妨设其为已知常数。

U 与 w 的系数为正，意味着均指向对应轴的负方向。U 指向 x 轴的负方向是为方便之后作图，而 w 由于主要代表重力作用，也应指向 z 轴负方向。

这里 C_0 表示新生成的浓度，由单位时间生成浓度为 Q，C_0 应满足 $\iiint C_0 \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}z = Q$，无量纲化后可任意指定 Q 为方便计算的值。由于已经假定了每个时刻排出烟尘的一致，C_0 与 t 无关。

此外，假定地面边界有形状 $s(x,y)$，可能具有一定的吸收与反射比例，将在之后边界条件的部分进行详细讨论。

§4.2 有限差分法

4.2.1 基本介绍

为了求解上述偏微分方程，我们采用有限差分法进行数值模拟。具体地，我们将三维空间离散化，得到一个网格状的空间，并在每个网格点上计算灰尘浓度，根据扩散方程进行更新。

对偏微分方程的另一个常用的离散方法为控制容积法。由于选取一定的型线可以得到和有限差分法相同的形式，且控制容积的写法不易于从数学上进行分析，我们采取较直接的差分方式。

假设 x,y,z 的模拟范围分别是 $[x_1,x_2],[y_1,y_2],[z_1,z_2]$，选取的空间步长为 h，时间步长为 h_t，则问题变为，已知此刻的三维矩阵 $C^i_{xs\times ys\times zs}$，如何得到下一刻的矩阵 $C^{i+1}_{xs\times ys\times zs}$，其中 $xs=\frac{x_2-x_1}{h}+1$ 是 x 方向以 h 为步长离散出的格点数（含边界），其他方向同理。只要能够正确迭代，通过取 $z=0$ 即可得到每一刻的地表浓度分布。

接下来介绍两个常用的迭代求解方法，也是本文实现的做法。值得注意的是，本节中介绍的方法均不考虑边界条件，也即迭代规律只对内部的点有效。

4.2.2 FTCS 格式

若 $C^l_{i,j,k}$ 表示 lh_t 时刻 (ih,jh,kh) 位置的浓度，$w^l_k=w(kh,lh_t)$，$\partial^n_a C^l_{i,j,k}$ 表示此点对 a 求 n 阶导数的值，由泰勒展开可推得：

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}+O(h^2)$$

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}+O(h)$$

$$f''(x)=\frac{f(x+h)+f(x-h)-2f(x)}{h^2}+O(h^2)$$

因此有

$$\partial_t C^l_{i,j,k}=\frac{C^{l+1}_{i,j,k}-C^l_{i,j,k}}{h_t}+O(h_t)$$

$$\partial_x C^l_{i,j,k}=\frac{C^{l+1}_{i+1,j,k}-C^l_{i-1,j,k}}{2h}+O(h^2)$$

$$\partial^2_x C^l_{i,j,k}=\frac{C^{l+1}_{i+1,j,k}+C^l_{i-1,j,k}-2C^l_{i,j,k}}{h^2}+O(h^2)$$

整理得迭代公式（此处将无量纲化的风速 U 记为 v）

$$\begin{aligned} C_{i,j,k}^{l+1} =& C_{i,j,k}^{l} + \frac{vh_t}{2h}(C_{i+1,j,k}^{l} - C_{i-1,j,k}^{l}) + \frac{w_k^l h_t}{2h}(C_{i,j,k+1}^{l} - C_{i,j,k-1}^{l}) \\ &+ \frac{Dh_t}{h^2}(C_{i+1,j,k}^{l} + C_{i-1,j,k}^{l} + C_{i,j+1,k}^{l} - C_{i,j-1,k}^{l} + C_{i,j,k+1}^{l} + C_{i,j,k-1}^{l} - 6C_{i,j,k}^{l}) \end{aligned} \tag{4.2}$$

这个公式对时间向前差分的，而对空间中心差分，因此称作 Foward Time and Central Space(FTCS) 格式。根据带误差的形式可看出它对时间有一阶误差，对空间则有二阶误差。

4.2.3 C-N 格式

为了在时间上也达到二阶误差，可以采用 Crank-Nicolson(C-N) 格式，表达式如下：

$$\begin{aligned} C_{i,j,k}^{l+1} =& C_{i,j,k}^{l} + \frac{1}{2}\Bigg(\frac{vh_t}{2h}(C_{i+1,j,k}^{l} - C_{i-1,j,k}^{l}) + \frac{w_k^l h_t}{2h}(C_{i,j,k+1}^{l} - C_{i,j,k-1}^{l}) \\ &+ \frac{Dh_t}{h^2}(C_{i+1,j,k}^{l} + C_{i-1,j,k}^{l} + C_{i,j+1,k}^{l} - C_{i,j-1,k}^{l} + C_{i,j,k+1}^{l} + C_{i,j,k-1}^{l} - 6C_{i,j,k}^{l}) \\ &+ \frac{vh_t}{2h}(C_{i+1,j,k}^{l+1} - C_{i-1,j,k}^{l+1}) + \frac{w_k^{l+1} h_t}{2h}(C_{i,j,k+1}^{l+1} - C_{i,j,k-1}^{l+1}) \\ &+ \frac{Dh_t}{h^2}(C_{i+1,j,k}^{l+1} + C_{i-1,j,k}^{l+1} + C_{i,j+1,k}^{l+1} - C_{i,j-1,k}^{l+1} + C_{i,j,k+1}^{l+1} + C_{i,j,k-1}^{l+1} - 6C_{i,j,k}^{l+1})\Bigg) \end{aligned} \tag{4.3}$$

容易看出，这个式子事实上是在相邻的时间上计算了 FTCS 差分的更新步长，并将两个步长进行了平均。通过泰勒展开分析可以证明，这个做法的误差对时间也是二阶的。由于式子中不止出现了一个第 $l+1$ 步的值，事实上需要将上标 $l+1$ 的项移植左侧，联合边界条件得到方程组，并通过方程组求解下一步的值。

这种需要求解方程得到下一步值的方法称为隐式方法，而 FSTC 这类可以直接计算的格式则称为显式方法。不难想到，隐式方法的计算开销会远远高于显式方法，但可以保证更高的精度。

§4.3 稳定性分析

在运用迭代格式进行求解之前，一般需要先进行稳定性的分析来确保迭代的有效。我们采用常用的 von Neumman 分析方法进行考察，以此确定 h_t 与 h 的基本取值。

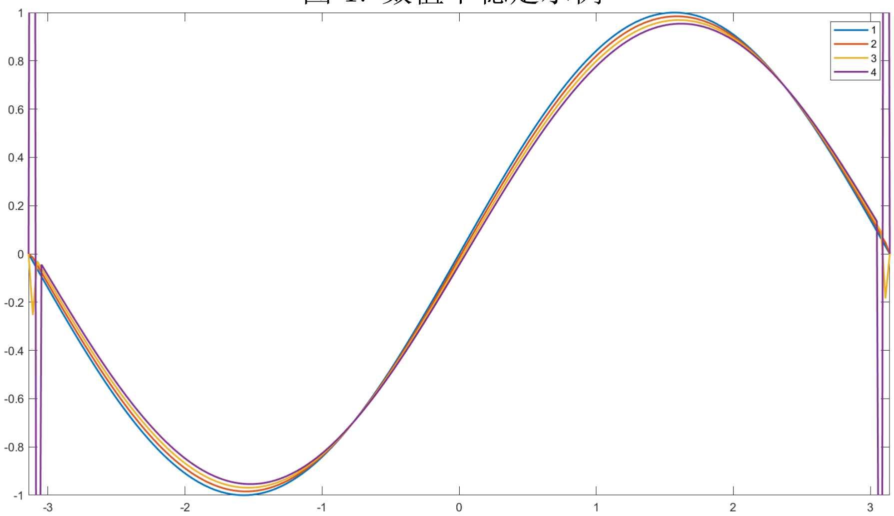
4.3.1 von Neumman 方法

一般来说，当其他都已经固定时，任何有效的方法只要 h_t 充分小都能做到稳定，但若 h_t 取得过大，哪怕对于很简单的方程，也会产生无法控制的误差。例如，考虑方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial C}{\partial x} \tag{4.4}$$

对初值 $C(0,x) = \sin(x)$，取 $h = \frac{\pi}{100}, h_t = \frac{\pi}{200}$ 进行 FTCS 的前几次迭代效果如图 **1** 。

图 1: 数值不稳定示例



可以看到，仅仅迭代三次时边界处已经出现了明显的问题，迭代四次后图形完全失真。因此，我们必须事先确定怎样的 h_t 能使迭代稳定进行。

无论对何种迭代格式，假设精确解为 $D^l_{i,j,k}$，数值解为 $N^l_{i,j,k}$，误差满足 $\epsilon = N - D$，由于迭代格式中每个部分都是一次线性，容易发现误差 ϵ 与 N 满足完全相同的迭代格式。下面以一维为例简单介绍如何对误差采用 Fourier 方法进行分析。

假定 ϵ 可以在定义域 $[-l, l]$ 上展开成有限项的 Fourier 级数

$$\epsilon(x, t) = \sum_m b_m(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_m x}$$

这里 k_m 代表波数，假设解域离散成 M 个子域，也即 $M = \frac{2l}{h}$，不妨令其为偶数，则结点个数共 $M+1$，波数可以写成 $k_m = \frac{m\pi}{l}$。$|k_m|$ 最小为 0，最大为 $\frac{M\pi}{2l}$.

同样由于线性性，迭代结果是每个 k_m 结果的叠加。对任何一个 k_m 分析，并假设 $b_m(t)$ 有 e^{at} 的形式（这里的两步形式假设都是分离变量法常得到的结果形式）。这样，可直接得到误差满足

$$\epsilon^l_i = \mathrm{e}^{ah_t l}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kah}$$

欲稳定，也即误差模长对时间不能发散，必须满足 $|\mathrm{e}^{ah_t}| \le 1$ 对任何 k_m 成立，记放大因子 $g = \mathrm{e}^{ah_t}$，只要得到了离散方法放大因子的表达形式，就能进行收敛性的分析，这就将收敛性问题转化成了函数上界问题。

4.3.2 FTCS 格式分析

回顾式 (4.2) 的 FTCS 方法迭代格式，假设代入

$$\epsilon^l_{i,j,k} = g^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_x hi + k_y hj + k_z hk)}$$

两边同时除以 $\epsilon_{i,j,k}^l$ 可以得到

$$\begin{aligned} g =& 1 + \frac{vh_t}{2h}\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_xh} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_xh}\big) + \frac{w_k^lh_t}{2h}\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_zh} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_zh}\big) \\ &+ \frac{Dh_t}{h^2}\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_xh} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_xh} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_hy} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_yh} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_zh} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_zh} - 6\big) \end{aligned} \tag{4.5}$$

进一步化简可得

$$g = 1 + \mathrm{i}\left(\frac{vh_t}{h}\sin(k_xh) + \frac{w_k^lh_t}{h}\sin(k_zh)\right) + \frac{2Dh_t}{h^2}\big(\cos(k_xh) + \cos(k_yh) + \cos(k_zh) - 3\big)$$

由于我们只需要确定大致量级，不妨假设 w_k^l 为恒定值 w。记 $\theta_{x,y,z} = k_{x,y,z}h/2$，则收敛须

$$\begin{aligned} |g|^2 &= \left(\frac{vh_t}{h}\sin 2\theta_x + \frac{wh_t}{h}\sin 2\theta_z\right)^2 + \left(\frac{2Dh_t}{h^2}\big(\cos 2\theta_x + \cos 2\theta_y + \cos 2\theta_z - 3\big) + 1\right)^2 \\ &= \left(\frac{vh_t}{h}\sin 2\theta_x + \frac{wh_t}{h}\sin 2\theta_z\right)^2 + \left(1 - \frac{4Dh_t}{h^2}\big(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_y + \sin^2\theta_z\big)\right)^2 \le 1 \end{aligned} \tag{4.6}$$

想要范围内此式取极大，$\sin^2\theta_y$ 必然为 0 或 1，这时展开消去可得

$$h_t(v\sin\theta_x\cos\theta_x + w\sin\theta_z\cos\theta_z)^2 - D(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z)\left(2 - \frac{4Dh_t}{h^2}\big(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z\big)\right) \le 0$$

$$h_t(v\sin\theta_x\cos\theta_x + w\sin\theta_z\cos\theta_z)^2 - D(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z + 1)\left(2 - \frac{4Dh_t}{h^2}\big(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z + 1\big)\right) \le 0$$

或写成

$$h_t \le \frac{2h^2D(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z)}{h^2(v\sin\theta_x\cos\theta_x + w\sin\theta_z\cos\theta_z)^2 + 4(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z)^2D^2} \tag{4.7}$$

$$h_t \le \frac{2h^2D(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z + 1)}{h^2(v\sin\theta_x\cos\theta_x + w\sin\theta_z\cos\theta_z)^2 + 4(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z + 1)^2D^2} \tag{4.8}$$

由 h 相对 D, v, w 为小量，式 (4.8) 分母第一项可以删去，直接化为

$$h_t \le \frac{h^2}{2(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z + 1)^2D} \le \frac{h^2}{6D} \tag{4.9}$$

对式 (4.7)，只要 θ_x, θ_z 不都趋于 0，分母第一项就可以删去，变为

$$h_t \le \frac{h^2}{2(\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z)^2D} \le \frac{h^2}{4D} \tag{4.10}$$

而均趋于 0 时，分母第二项删去，$|\cos\theta_x| = |\cos\theta_z| = \pm 1$，利用柯西不等式有

$$h_t \le 2D\frac{\sin^2\theta_x + \sin^2\theta_z}{(v\sin\theta_x \pm w\sin\theta_z)^2} \le \frac{2D}{\sqrt{v^2 + w^2}} \tag{4.11}$$

综合式 (4.9) 到式 (4.11) 得到

$$h_t \le \min\left\{\frac{h^2}{6D}, \frac{2D}{\sqrt{v^2 + w^2}}\right\}$$

考虑到 h_t 为小量，一般只需要满足第一个限制即可，由于上方忽略了部分小量的影响，实际分母系数应比 6 稍大。类似地，对一维有风情况可以推出 $h_t \le \min\left\{\frac{h^2}{2D}, \frac{2D}{v}\right\}$，二维且有某方向风时结果是 $h_t \le \min\left\{\frac{h^2}{4D}, \frac{2D}{v}\right\}$。一般结果为 n 维时：

$$h_t \le \min\left\{\frac{h^2}{2nD}, \frac{2D}{\|\mathbf{u}\|}\right\} \tag{4.12}$$

4.3.3 C-N 格式分析

与 FTCS 相比，C-N 格式的稳定性反而较为简单。记

$$A = \mathrm{i}\left(\frac{vh_t}{h}\sin(k_x h) + \frac{w_k^l h_t}{h}\sin(k_z h)\right) + \frac{2Dh_t}{h^2}\big(\cos(k_x h) + \cos(k_y h) + \cos(k_z h) - 3\big)$$

则代入 C-N 格式后有

$$g = 1 + \frac{1}{2}(A + gA) \Leftrightarrow g = \frac{1 + A/2}{1 - A/2}$$

因此直接设 $A = a + b\mathrm{i}$ 计算可得

$$|g| \le 1 \Leftrightarrow \mathrm{Re}A \le 0$$

而这也就意味着

$$\frac{2Dh_t}{h^2}\big(\cos(k_x h) + \cos(k_y h) + \cos(k_z h) - 3\big) \le 0 \tag{4.13}$$

由于式 (4.13) 恒成立，C-N 格式是恒稳定的。这也揭示了它在误差阶小之外的优势。因此，在利用 C-N 格式进行迭代时，可以将时间步长提升，仍能达到较好的效果。

五、 求解方案选择

在上一节，我们确定了不同有限差分法的稳定条件，于是可以构造差分求解。但是，在求解过程中，仍然有很多细节问题需要处理，本节主要介绍模拟边界而非真实边界的“伪边界”处理与 C-N 格式的实际实现。

§5.1 伪边界处理

5.1.1 一维问题

考虑一维的对流扩散方程：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U\frac{\partial C}{\partial x} \tag{5.1}$$

进行预处理

```
U = U * ht / h / 2;
D = D * ht / h ^ 2;
```

后，一维 FTCS 的主要迭代部分的实现为：

```
d2x = C(i-1, 3:xs) + C(i-1, 1:xs-2) - 2 * C(i-1, 2:xs-1);
C(i, 2:xs-1) = C(i-1, 2:xs-1) ...
    - U * (C(i-1, 3:xs) - C(i-1, 1:xs-2)) + D * d2x;
```

假设只给定初值，没有边界控制，任何 C 事实上会向整个实轴进行扩散。但是，由于模拟的范围是有限的，必须在模拟的边界处进行近似。我们将这类并不存在边界条件的边界情况称为“伪边界”。

由于一维的情况容易得到解析解，并且可以通过控制边界不同情况量化数值解，伪边界的处理优劣通过一维情况分析即可。我们对式 (4.4) 在范围 $[-\pi, \pi]$ 内以 $h = \frac{\pi}{100}, h_t = \frac{h^2}{2}$ 进行离散（h_t 的选取利用了式 (4.12)），并迭代至 $t = 1$，考察结果与精确解 $C(t, x) = \mathrm{e}^{-t}\sin(x - t)$ 的误差。

5.1.2 边界方案

在这个问题中，伪边界为 $C(t, -\pi)$ 与 $C(t, \pi)$ 两点。我们对比了如下四种策略（除了代码的三种外，还有一种是不进行任何处理）：

```
if border_type == 1
    C(i, 1) = C(i, 2);
    C(i, end) = C(i, end - 1);
end
if border_type == 2
    C(i, 1) = 2 * C(i, 2) - C(i, 3);
    C(i, end) = 2 * C(i, end - 1) - C(i, end - 2);
end
if border_type == 3
    C(i, 1) = C(i-1, 1) + D * (C(i-1, 2) * 2 ...
        - C(i-1, 1) - C(i-1, 3)) ...
        + U * 2 * (C(i-1, 2) - C(i-1, 1));
    C(i, end) = C(i-1, end) + D * (C(i-1, end-1) * 2 ...
        - C(i-1, end) - C(i-1, end-2)) ...
        + U * 2 * (C(i-1, end) - C(i-1, end-1));
end
```

具体来说为：

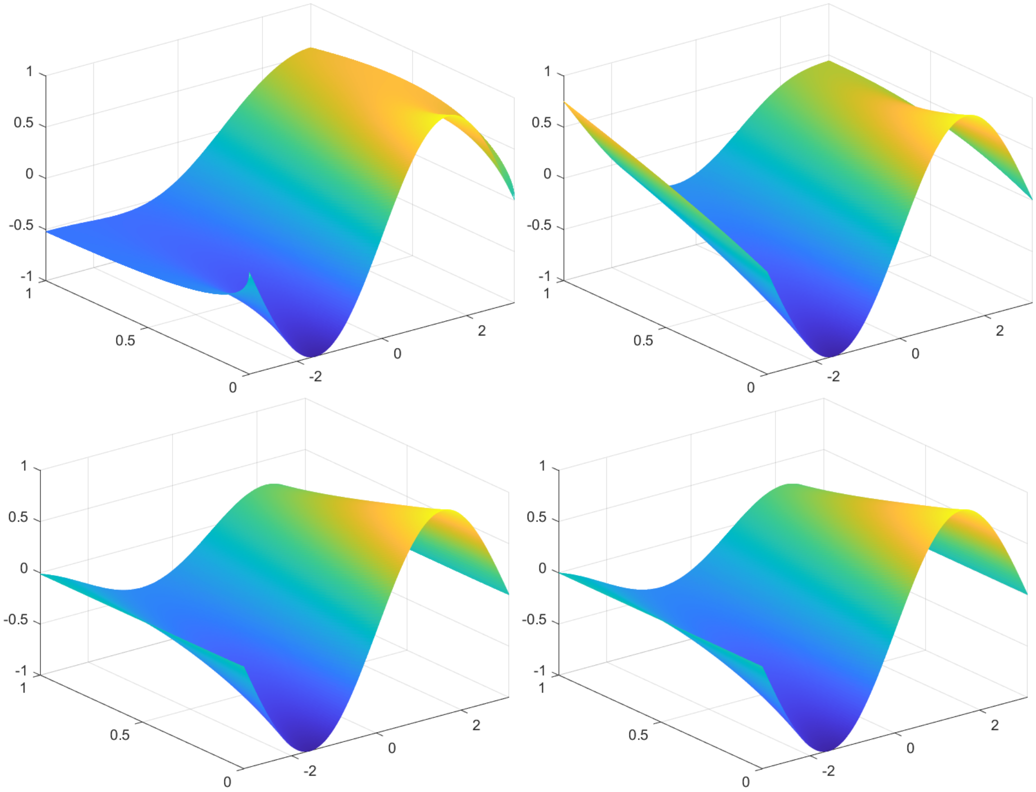
1. 控制边界的值与最近的内部点值相同；

2. 控制边界的值使得最近的内部点处近似线性，二阶导为 0；
3. 利用不越界的相关差分值估算一阶、二阶导，并对应更新边界处；
4. 不改变边界处的值，与初值一致。

5.1.3 效果对比

取定四种边界条件后的迭代过程可视化如**图 2** 。

图 2: 边界条件迭代过程对比



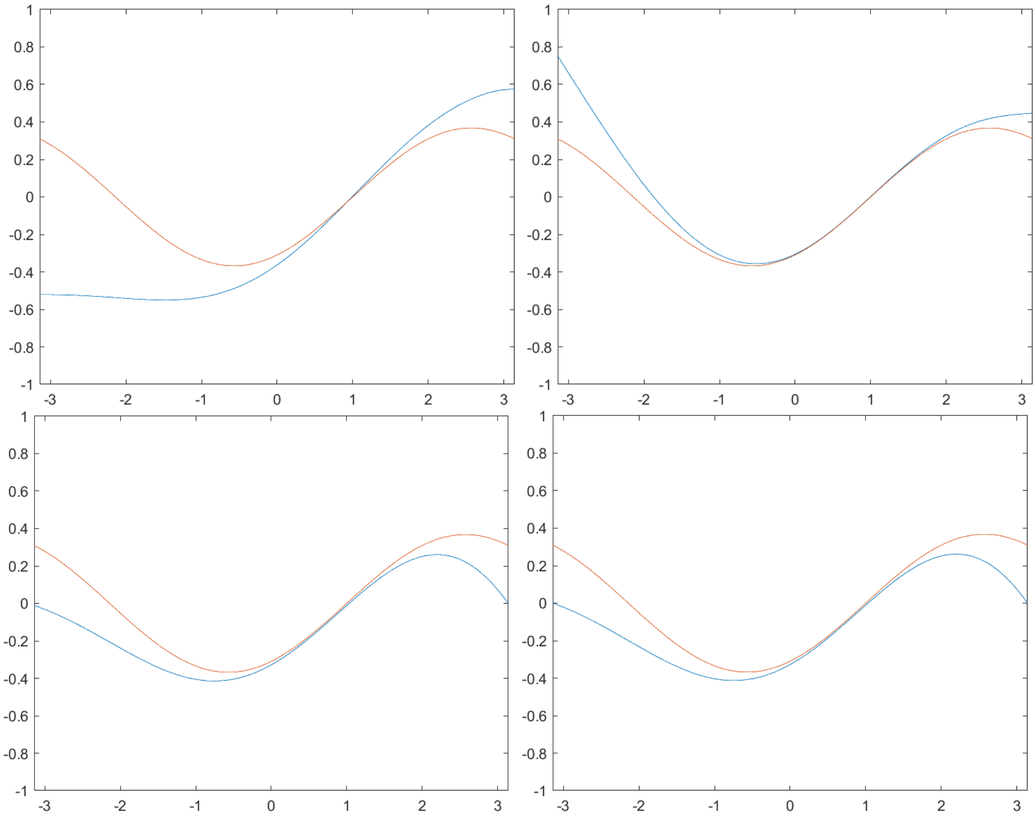
这里 0 到 1 的轴为时间变化，$-\pi$ 到 π 的轴为模拟的结果。从直观来看，三四两种方案形成的结果是类似的，而第一种方案明显导致了结果偏高。事实上，四种方案与 $t = 1$ 处的真实解的平均误差分别为 0.1069、0.2333、0.0707 与 0.1097。

图 3 展示了 $t = 1$ 时刻四种边界条件的模拟结果（蓝线）与实际情况（红线）的对比。从结果可以发现，虽然第三种方法的最大误差看起来更大，但在边界衰减处的模拟更加准确，也在更多部分紧密贴合解析解，因此平均误差是最低的。考虑到在烟尘扩散问题中，大部分情况的边界是衰减的，用第三种方式进行处理更加合适，也相对节省计算开销。

下面考察一个更接近烟尘扩散模型的例子。在刚才的方程中，令

$$C(0, x) = \mathrm{e}^{-6x^2}$$

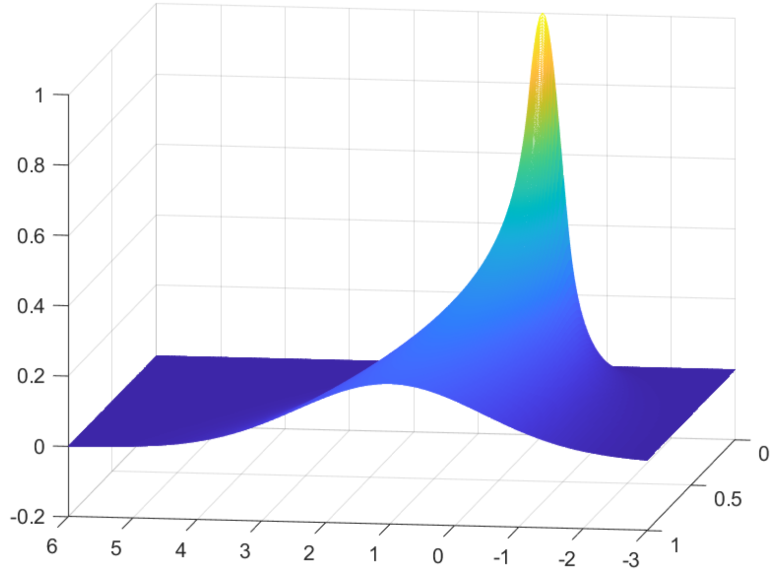
图 3: 边界条件模拟结果对比



这个函数在 $|x| = 2.5$ 处即达到了数值精度意义上的 0，基本符合一小块区域内的烟尘初始条件（若系数 6 进一步增大，可以进一步模拟集中的烟尘）。

采取第三种方式处理伪边界，在 1 秒内，模拟结果如**图 4**，可以看出烟尘中心在风向下的偏移。

图 4: 一维烟尘扩散模拟



§5.2 稳定性

上节中，我们讨论了 FTCS 迭代格式与 C-N 迭代格式各自的优劣，为找到合适的方案，三维进行一次计算的开销较大，且无法直观看到迭代过程，因此通过二维情况进行研究。

5.2.1 二维问题与稳态解

二维情况的方程组如下：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = U\frac{\partial C}{\partial x} + D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right) + C_0(x, y) \tag{5.2}$$

这个方程相当于不考虑 z 方向运动时的情况，具有很明确的实际意义：假设烟尘达到了稳态，最终所有灰尘必然会落到对应 (x, y) 值的地面上，因此 z 方向相当于直接累计，无需再考虑扩散。因此，求解二维情况的方程组事实上是在求解烟尘地面浓度的**稳态分布**。

与一维进行相同的对 U, D 的预处理后，一次 FTCS 迭代如下：

```
d2x = C(3:xs, 2:ys-1) + C(1:xs-2, 2:ys-1) + C(2:xs-1, 1:ys-2) ...
    + C(2:xs-1, 3:ys) - 4 * C(2:xs-1, 2:ys-1);
du = U * (C(3:xs, 2:ys-1) - C(1:xs-2, 2:ys-1)) + D * d2x;
C(2:xs-1, 2:ys-1) = C(2:xs-1, 2:ys-1) + du;

% manage border
C(:, 1) = 2 * C(:, 2) - C(:, 3);
C(1, :) = 2 * C(2, :) - C(3, :);
C(:, end) = 2 * C(:, end - 1) - C(:, end - 2);
C(end, :) = 2 * C(end - 1, :) - C(end - 2, :);

% renew u by newly generated
for a = 1:xs
    C(a, :) = C(a, :) + f((i-1)*ht, x(a), y);
end

% deal with negative
C = max(C, 0);
```

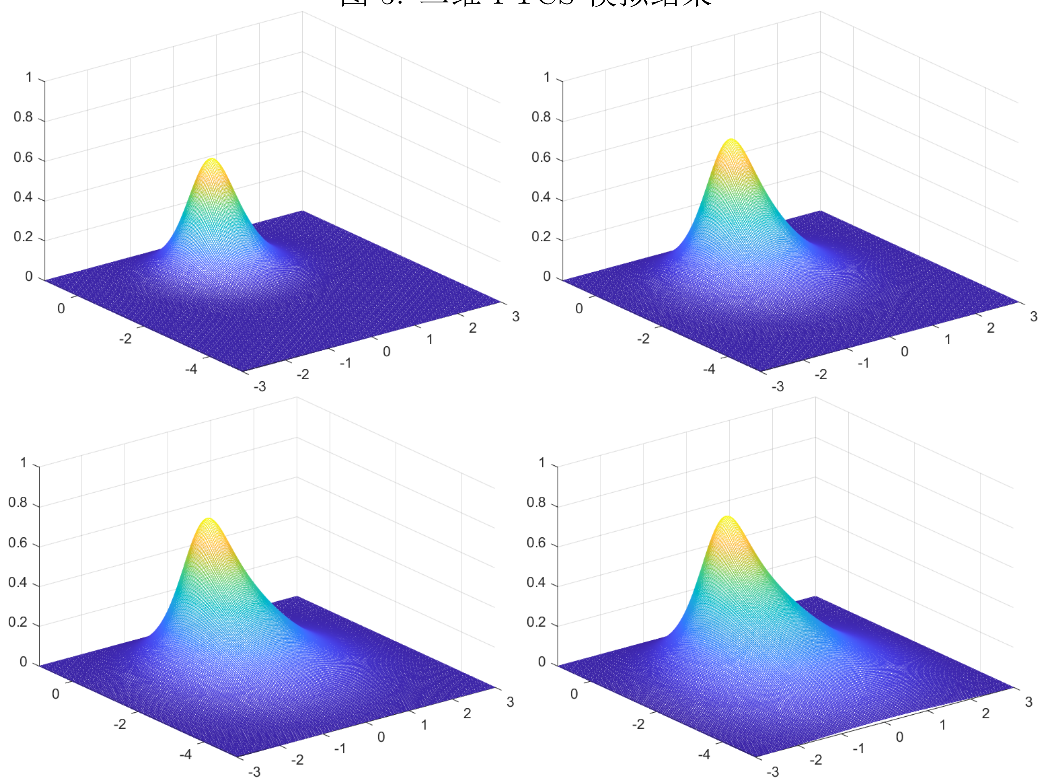
与一维相比，计算、更新的过程基本一致，且边界条件仍采用第三种处理。需要说明的是，由于求解的是浓度的分布，任何点浓度不可能低于 0，因此如果有向下溢出至负数的情况，我们在迭代过程中将其置为 0。

取 $U=3, D=1, x\in[-5,1], y\in[-3,3], t\in[0,1], h=0.03, h_t=0.25h^2$，并假设输入为（每次迭代时的叠加应为 h_tC_0）

$$C_0(x,y)=7\mathrm{e}^{-6(x^2+y^2)}$$

可以得到如**图 5** 的模拟结果，四张图分别表示 $t=0.25,0.5,0.75,1$ 的情况。

图 5: 二维 FTCS 模拟结果



5.2.2 预估-校正实现 C-N

由于误差阶数与稳定性的问题，FTCS 的效果是不如 C-N 理想的。但是，C-N 算法涉及的稀疏方程组求解过程又耗时较高：对一维情况，C-N 产生的是三对角阵，可以直接用追赶法达到 $O(n)$ 复杂度求解，但二维、三维时由于相邻关系的复杂性，即使非零元素个数是 $O(n)$ 量级，也并不存在简单的求解形式，一般至少需要 $O(n^2)$ 的计算量。由于这里的 n 是所有要求解的点数，又正比于三边分段数的乘积，复杂度是不可接受的。

因此，我们采用了如下称为预估-校正的技术进行实现：

```
Cold = C;

% predictor
du = C(3:xs, 2:ys-1) + C(1:xs-2, 2:ys-1) + C(2:xs-1, 1:ys-2) ...
    + C(2:xs-1, 3:ys) - 4 * C(2:xs-1, 2:ys-1);
```

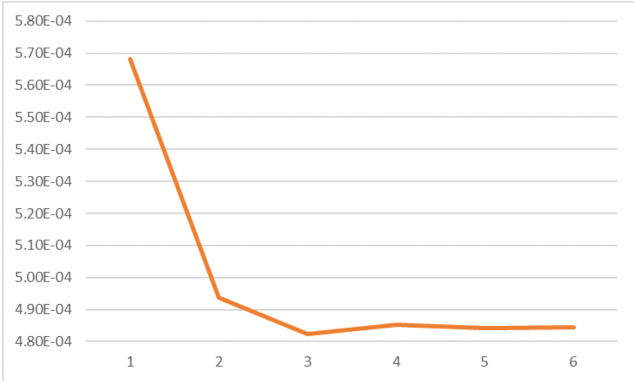
```
du = U * (C(3:xs, 2:ys-1) - C(1:xs-2, 2:ys-1)) + D * du;
C(2:xs-1, 2:ys-1) = C(2:xs-1, 2:ys-1) + du;

% manage border
C(:, 1) = 2 * C(:, 2) - C(:, 3);
C(1, :) = 2 * C(2, :) - C(3, :);
C(:, end) = 2 * C(:, end - 1) - C(:, end - 2);
C(end, :) = 2 * C(end - 1, :) - C(end - 2, :);

for j = 1:T
    % corrector
    du1 = C(3:xs, 2:ys-1) + C(1:xs-2, 2:ys-1) + C(2:xs-1, 1:ys-2) ...
        + C(2:xs-1, 3:ys) - 4 * C(2:xs-1, 2:ys-1);
    du1 = U * (C(3:xs, 2:ys-1) - C(1:xs-2, 2:ys-1)) + D * du1;
    C(2:xs-1, 2:ys-1) = Cold(2:xs-1, 2:ys-1) + (du1 + du) / 2;

    % manage border
    C(:, 1) = 2 * C(:, 2) - C(:, 3);
    C(1, :) = 2 * C(2, :) - C(3, :);
    C(:, end) = 2 * C(:, end - 1) - C(:, end - 2);
    C(end, :) = 2 * C(end - 1, :) - C(end - 2, :);
end
```

predictor 中的内容与 FTCS 迭代完全一致，只是保留了前一次的 Cold。我们将 FTCS 计算出的 C 作为新一次 C 的预估值，并且利用预估值由 C-N 格式重新计算 C 进行校正。可以说明，如果预估-校正进行充分多次，稳定情况下会收敛于 C-N 求解出的 C，也即相当于是隐式迭代求解 C-N 产生的方程组。因此，额外加入参数 T 决定进行几次校正。

5.2.3 效果对比

在刚才的例子下，模拟 $t = 2$ 时的最终扩散结果，以 $T = 0$ 的 FTCS 迭代作为基准，在 T 增大时对比差距，结果如**图 6**。可以发现，其逐渐收敛于 C-N 方法的结果。但是，分析可得，虽然这种预估-校正可以实现更好的精度，却并不能改进数值稳定性。由于通过 FTCS 进行预估，当 FTCS 发生数值不稳定时，校正次数越多反而会导致偏差越大（事实上，校正次数可以对应 $|g|$ 的指数，当 $|g| < 1$ 时次数更多能够更加稳定，而 $|g| > 1$ 时次数更多就会产生更大误差）。

图 6: 二维 CN 校正效果



例如，其他不变时，取 $h_t = 0.1h$，则 5 次迭代后最大的误差为：

表 2: **校正次数-误差关系表**

校正次数	0	1	2	3	4	5	6
误差	9e-2	1e-1	1e2	1e5	2e8	2e11	3e14

因此，预估-校正方法可以达到更精确的拟合，但 h_t 仍然需要取充分小才能稳定，这是相比直接求解 C-N 方程组的缺陷。

六、 三维扩散展示

在进行一维、二维的模拟分析后，我们可以进入三维问题式 (4.1) 的求解了。类似二维，我们可以得到三维的 FTCS 迭代格式：

```
du = C(1:xs-2, 2:ys-1, 2:zs-1) + C(3:xs, 2:ys-1, 2:zs-1) ...
    + C(2:xs-1, 1:ys-2, 2:zs-1) + C(2:xs-1, 3:ys, 2:zs-1) ...
    + C(2:xs-1, 2:ys-1, 1:zs-2) + C(2:xs-1, 2:ys-1, 3:zs) ...
    - 6 * C(2:xs-1, 2:ys-1, 2:zs-1);
du = U * (C(3:xs, 2:ys-1, 2:zs-1) - C(1:xs-2, 2:ys-1, 2:zs-1)) ...
    + w * (C(2:xs-1, 2:ys-1, 3:zs) - C(2:xs-1, 2:ys-1, 1:zs-2)) ...
    + D * du;
C(2:xs-1, 2:ys-1, 2:zs-1) = C(2:xs-1, 2:ys-1, 2:zs-1) + du;
```

在增添迭代预估-校正后，它即成为 C-N 格式。此外，我们对伪边界的处理仍然遵循上一节得到的更新方式。

以下假定生成的初始浓度空间分布满足 $C_0(x,y,z) = ae^{-b(x^2+y^2+(z-h)^2)}$ 的形式，并默认取 $h=1$，a,b 为正，按照可视化方便而设置，一般取 $a=30, b\in[5,6]$（仍然注意每个时间

的输入需要乘 h_t）。x, y, z 的范围分别取为 $[-8, 1]$、$[-3, 3]$、$[0, 1.5]$，风速 U 默认为 3 指向 x 轴负方向，扩散系数 D 默认为 1。设置 $h = 0.1, h_t = 0.001$，根据式 (4.12) 可知在 $D \leq 1.6$ 时都能保证稳定。之后作图时，代表最大浓度出现位置（浓度中心）的 position 均表示 x 的相反数。此外，本节中三维作图的 (x, y) 表示地面上的坐标，z 轴则表示地面该点当前时间的烟尘浓度。

§6.1 基本结果

6.1.1 简化处理

在这一部分，我们先对地面条件与重力条件进行简化处理，在之后再进行更详细的研究。

对于重力 w_k^l，此处假设灰尘密度较小，很快重力就与空气阻力达到平衡，使下降速度成为恒定值，也即 w 对任何点恒定。这里我们取 $w = 1$，在之后重力影响处详细讨论。

对于地面，我们假设地面是平整的，也即 $s(x, y) = 0$，且地面处的更新满足

$$C_{i,j,0}^{l+1} = \lambda C_{i,j,1}^{l+1} + (1 - \lambda)\big(2C_{i,j,1}^{l+1} - C_{i,j,2}^{l+1}\big) = (2 - \lambda)C_{i,j,1}^{l+1} + (\lambda - 1)C_{i,j,2}^{l+1} \tag{6.1}$$

这里的 λ 称为吸收系数。当 $\lambda = 0$ 时，地面更新的形式与伪边界相同，意味着不存在额外的堆积，只是反射到空中；而当 $\lambda = 1$ 时，地面更新为与最近的相同，这时近处所有的扩散、对流只能向 z 更大处，即体现了灰尘的堆积。取 $\lambda = 0.5$，详细讨论在后文边界情况处。

6.1.2 扩散过程

首先，无论参数如何选取，都存在一些共通的扩散过程，主要分为三个阶段（由于不同参数下阶段持续时间不同，这里的时间仅作为比例示意）：

1. 起始阶段

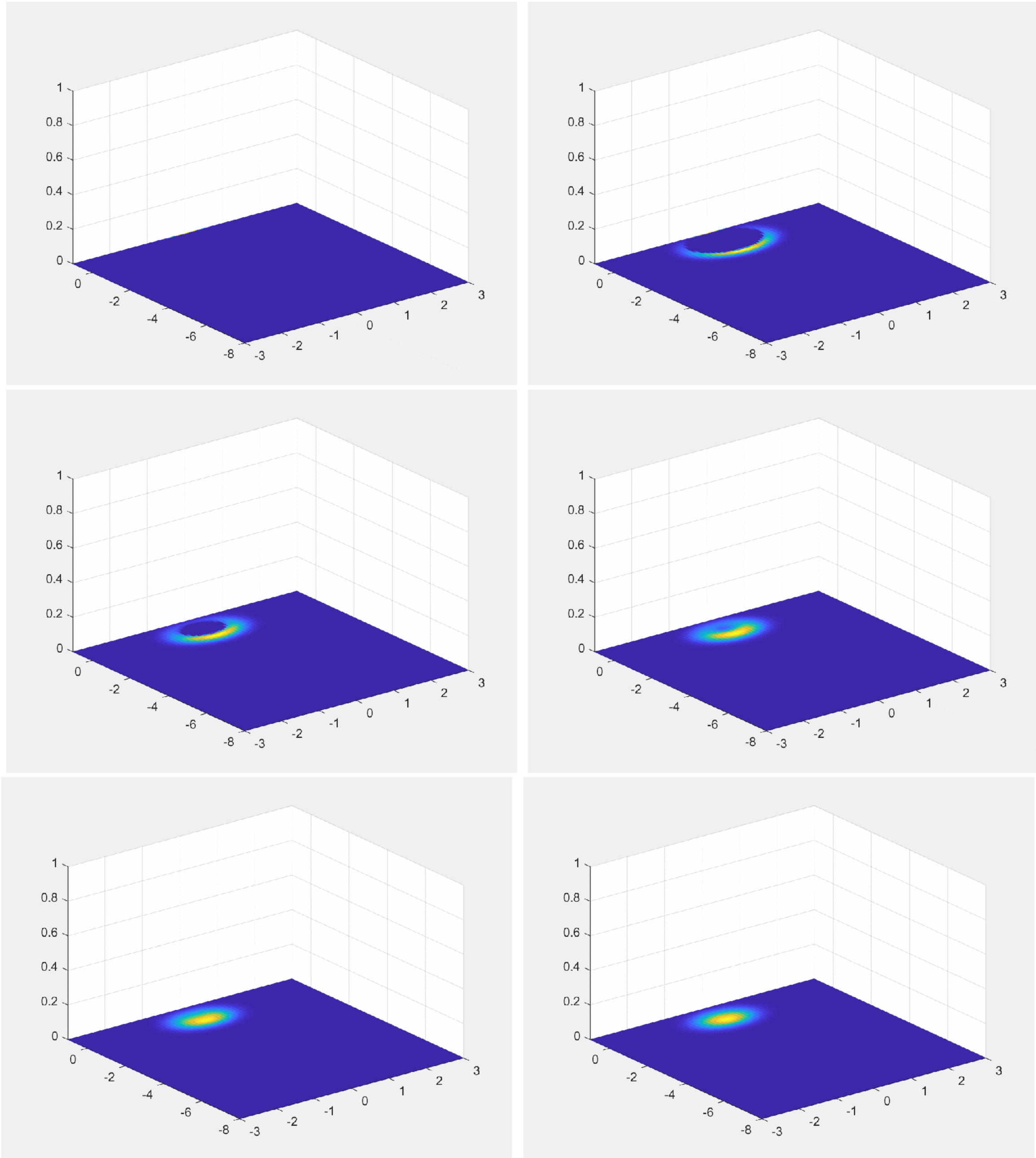
   在开始的前 0.3 秒内，地面上基本没有烟尘，这意味着烟尘尚未到达地面。紧接着出现的如**图 7** 。地面上的灰尘堆积出一个月牙形的密度分布（黄色代表密度较高，蓝色代表密度较低），然后迅速合并为等浓度线为凸的分布。

   六张图间的间隔均为 0.03 秒，因此起始阶段是个极快的过程。可以想到，初始的月牙形是扩散中的灰尘在重力、风力与扩散作用下首次到达地面的位置。由于扩散作用的影响，此时的浓度中心位置比起稳定后的真实浓度中心是偏远的，在合并为凸后逐渐接近开始的收敛位置。在这个例子中 $U = 3, w = 1$，因此初始的收敛位置接近 $x = 1/3$ 处。

2. 堆积阶段

   从 0.6 秒开始的较长一段时间，烟尘进入堆积阶段，起初的变化如**图 8** 的前四张图，两张图的间隔为 0.6 秒。在这个阶段，最大浓度快速上升，伴随着最大浓度位置随着风

图 7: 起始阶段

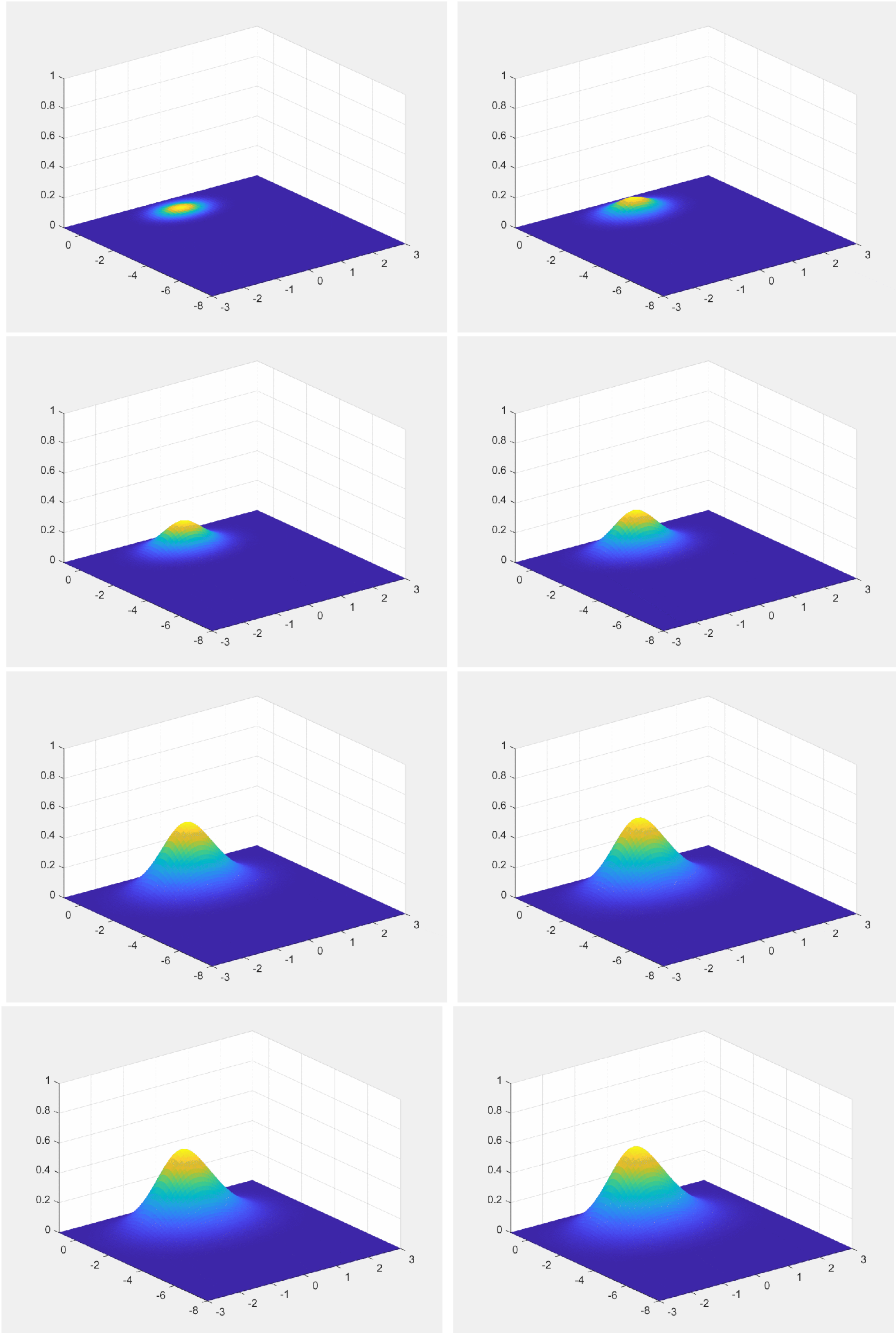


向向右平移（由于对称性与扩散性质，最大浓度必然在 $y = 0$ 时取到，因此最大浓度位置只需考虑 x 坐标）。堆积阶段接近结束的情况如**图 8** 的后四张图，为 5.1 秒开始、间距 0.6 秒的浓度变化情况。这时虽然增加已经不如开始那么迅速，但仍然相对明显。

在堆积阶段中，浓度中心的背风移动与浓度的增加基本是同步进行的，虽然中心移动主要是风力作用影响，浓度增加主要是扩散与重力的影响，但达到稳态前两者的变化率基本一致。

3. 稳定阶段

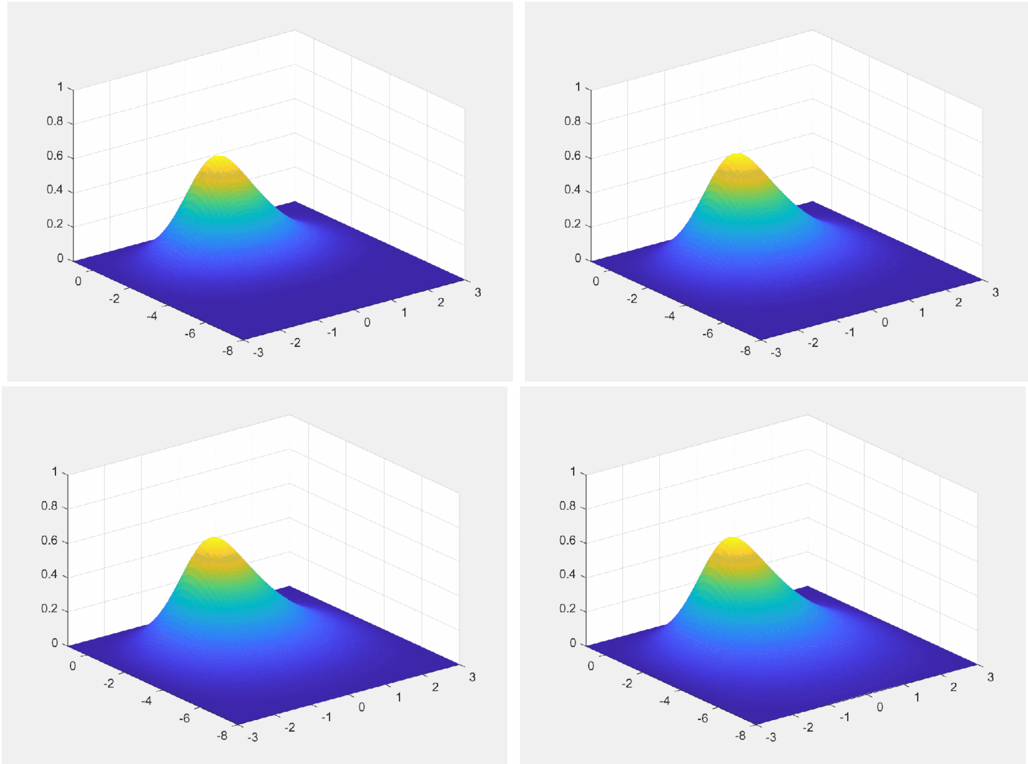
图 8: 堆积阶段



8 到 9 秒后，烟尘的堆积基本收敛于稳态，浓度中心与最大浓度都不再变化，进入稳定阶段。这时，视觉上图像不再有很大的差别，因此可以间隔较久比较。

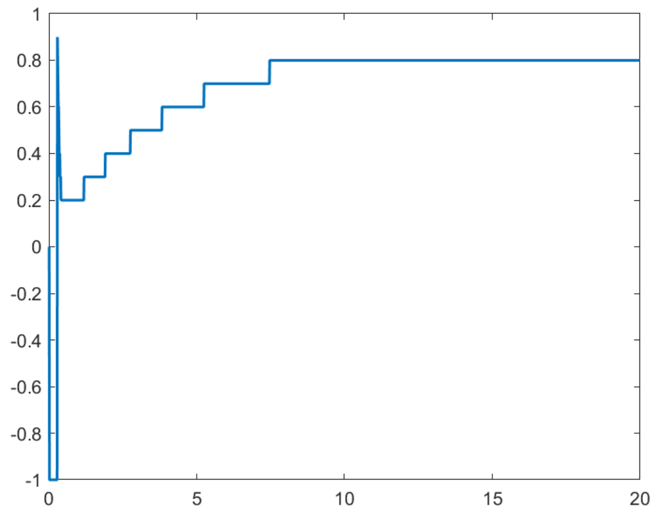
图 9 中，四张图分别在 9、12、15、18 秒时，可以直观看出稳定性。

图 9: 稳定阶段



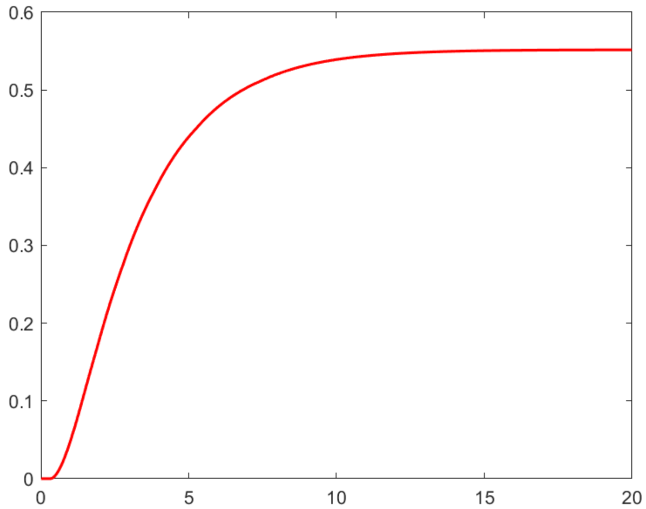
三个阶段的过程在考察浓度中心与最大浓度的变化时也会体现。浓度中心位置（x 坐标相反数）的变化过程如**图 10**，从中可以明显看出三个阶段的差别。起初认为 -1 为浓度中心是由于各个位置均无浓度，认为第一个位置是最大值。紧接着，位置突变为 0.9 并迅速下降，直到起始阶段结束。堆积阶段中，浓度中心背风移动，直到稳定。由于分割格点是以 0.1 为标准，浓度中心的移动在图中是离散的。

图 10: 浓度中心随时间变化



最大浓度变化则为**图 11**，这张图中虽然无法看出明显的起始阶段（只有初始为 0 的部分），不过斜率变化更加明显。

图 11: 最大浓度随时间变化



6.1.3 风速与扩散系数

考察完扩散的一般结果以后，我们可以观察各个参数的变化对扩散情况的影响。首先是易于直接调整的风速与扩散系数，在两者改变后，考虑 10 秒后的最大浓度、浓度中心，引起的变化如**图 12**、**图 13**。这里图例代表 D，横坐标代表 U。

图 12: 最大浓度随 D、U 变化

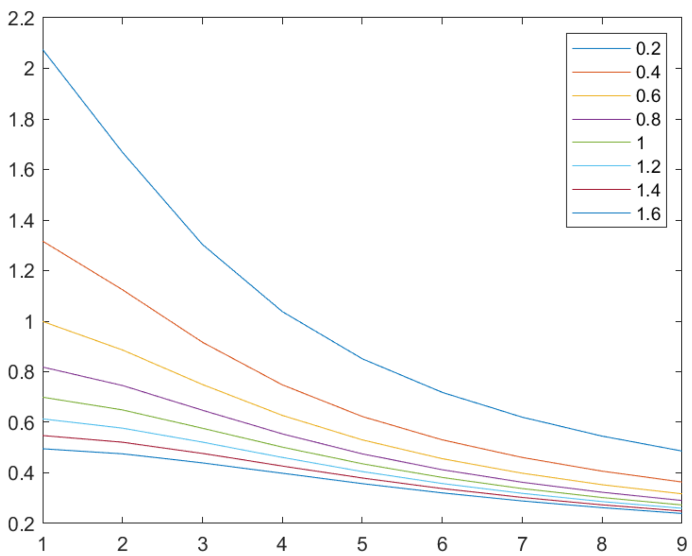
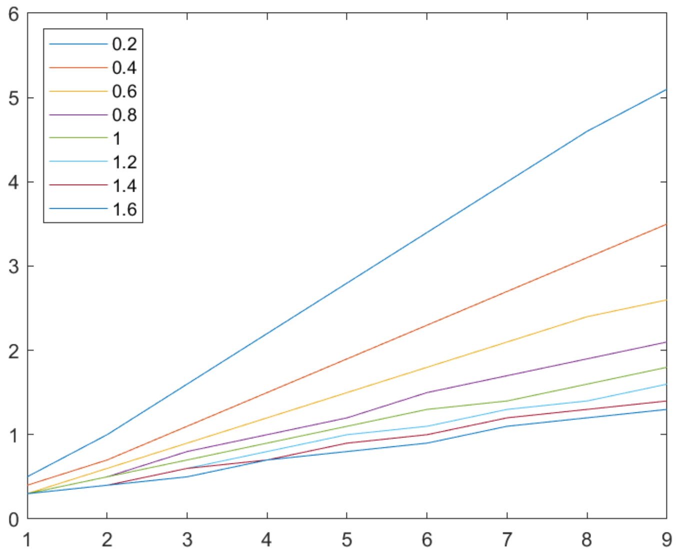


图 13: 浓度中心随 D、U 变化



总体来说，最大浓度随着 D, U 增大而下降；浓度中心则随着 D 增大而靠近中心，随着 U 增大而远离中心。此外，浓度中心随 U 的变化具有明显的线性性。

图 14: 风速与扩散系数的影响

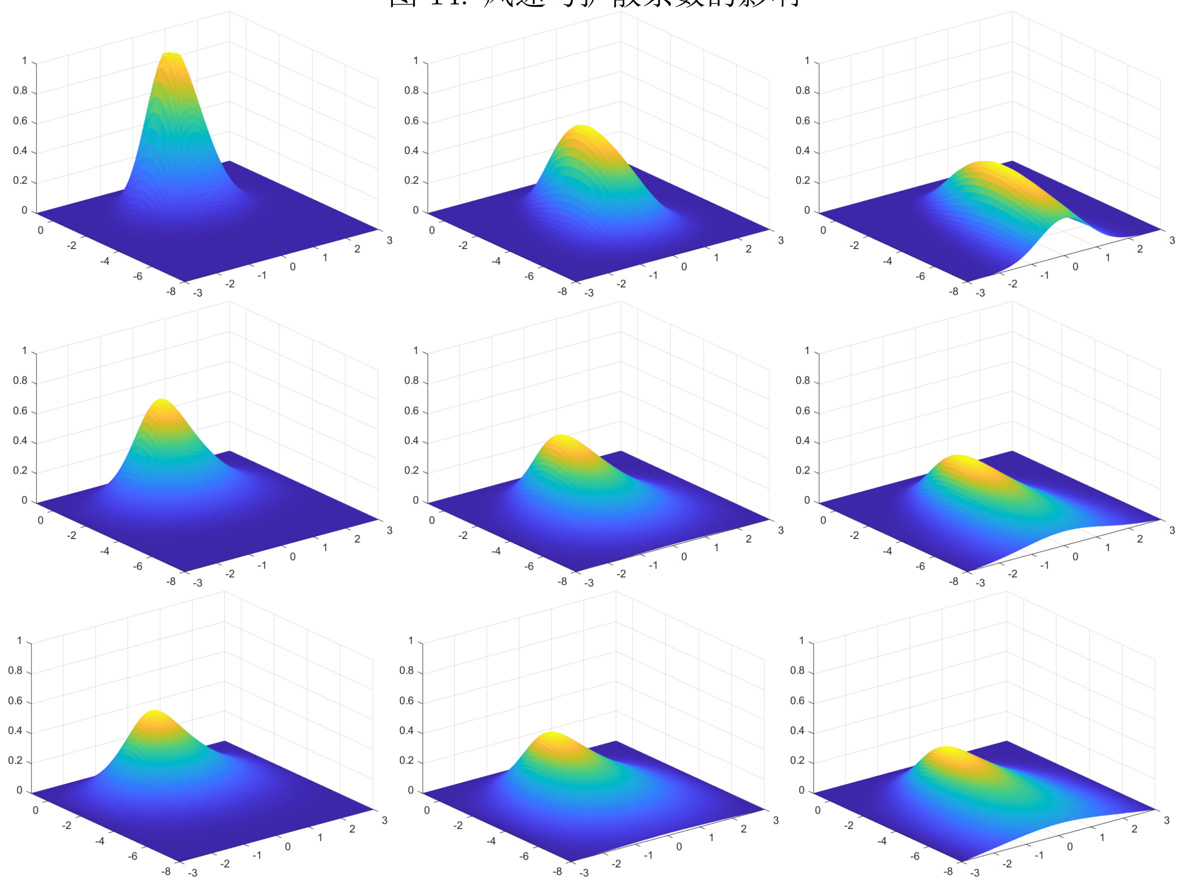
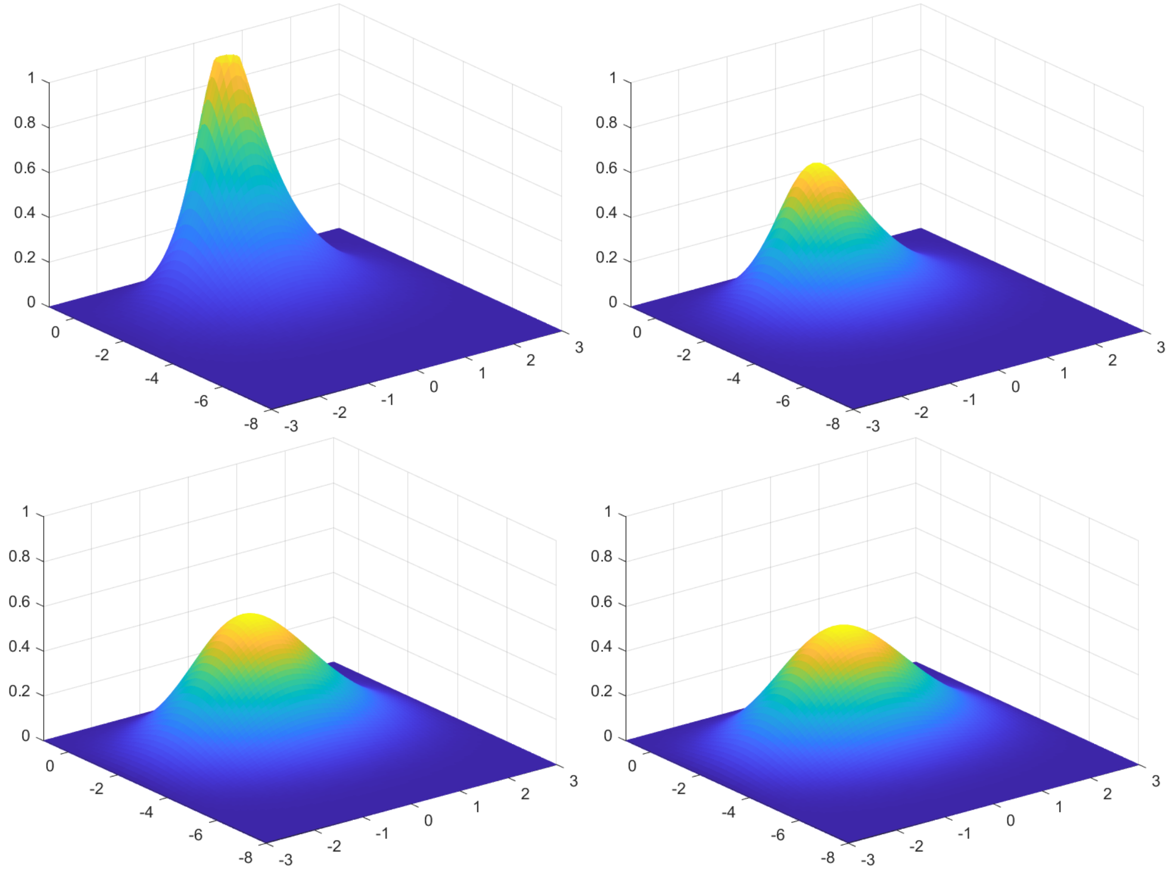


图 14 展示了 D 从上到下为 0.3、0.9、1.5，U 从左到右为 3、6、9 时的最终结果，λ 均设为 0.5。扩散系数大时，更容易接近地面的中心位置，但对应的浓度也更加分散，反之，系数在 $D=0$ 的极限情况下，烟尘直接顺着风向由重力降落至地面；而风速增加时，可以明显看到整个浓度分布背风的推移。

6.1.4 高度影响

除了这两个参量外，高度也可以进行调整，而高度的调整事实上是通过对应改变 C_0 实现的。取高度分别为 0.6、0.8、1、1.2，最终堆积效果如**图 15** 。

图 15: 高度的影响



直观看到，随着高度降低，在风吹拂更短时间就能达到地面，因此浓度升高、浓度中心偏离减小。

§6.2 重力项

接下来，我们需要考察重力作用的影响。刚才我们始终假设向下运动是匀速的，而这是简化了实际情况的。

6.2.1 重力项影响

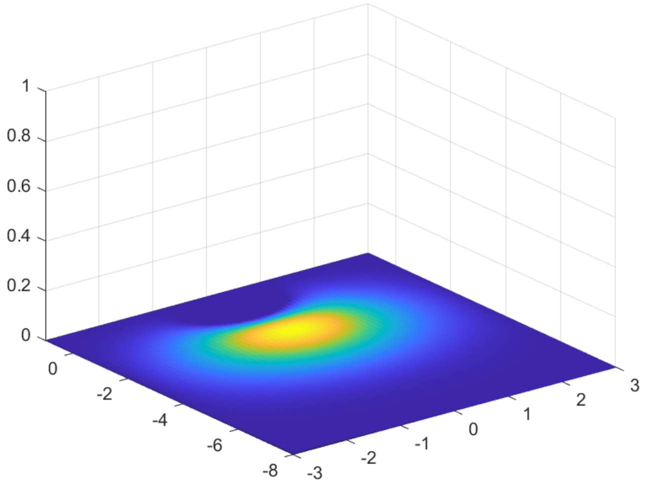
若允许输入各个 z 值处的平均速度 w，将 du 中更新 z 轴的部分从简单的差分乘积变为

```
for k = 2:zs-1
    du(:, :, k-1) = du(:, :, k-1) + w(z(k)) * ht / h / 2 ...
        * (C(2:xs-1, 2:ys-1, k+1) - C(2:xs-1, 2:ys-1, k-1));
end
```

即可实现输入重力函数。

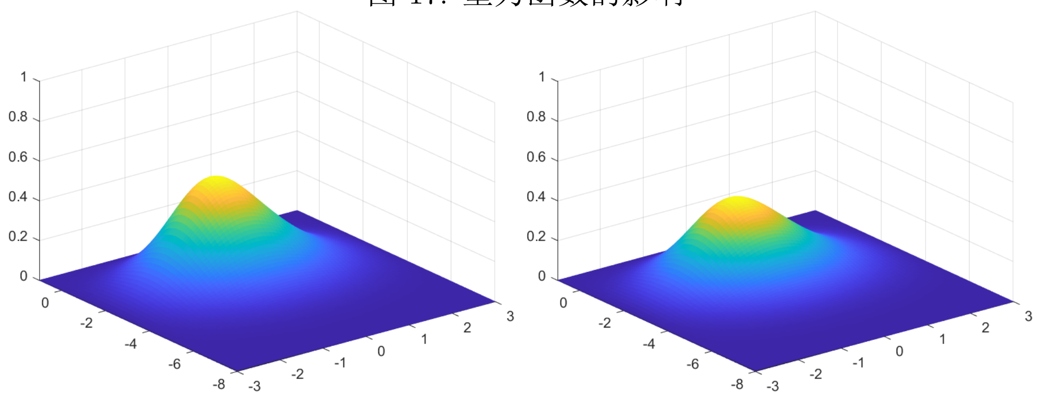
如果重力恒为 0，完全由扩散与风向决定，堆积效果为**图 16** 。可以发现，这时的形状始终符合初始阶段的月牙形等浓度线，因此，从起始阶段走向快速堆积事实上很大程度是重力作用的结果，否则凹陷会一直持续。此外，这时的堆积浓度也很低。

图 16: 重力为 0 的情况



而假设重力函数为 $2\sqrt{\max\{1-z,0\}}$（接近自由下落）、$1.5-z$（线性，作为对比），则效果如**图 17** 。

图 17: 重力函数的影响



从图中看出，重力项的形式不仅会影响堆积的浓度，也会影响堆积出的形状。

6.2.2 自适应重力更新

但是，这样的重力项是手工输入的平均下降速度，准确性完全依赖输入的函数，且无法控制随时间的变化。我们希望重力的系数能达到自适应的更新，也即通过过程中的浓度分布推导出每个 z 值的平均速度所具有的形式。

我们采用如下的更新公式：

$$s_k^l = \sum_{i,j} C_{i,j,k}^l, \quad w_k^{l+1} = \frac{s_k^{l+1} w_k^l + s_{k+1}^{l+1} \sqrt{w_{k+1}^l + Wh}}{s_k^{l+1} + s_{k+1}^{l+1}} \tag{6.2}$$

式 (6.2) 中，s_k^l 表示该时刻每个 z 层的浓度总量，而 w 的更新是通过本层原有的速度和上一层落到本层所增加的速度（$\sqrt{w_{k+1}^l + Wh}$ 满足自由落体的形式，由 W 调整阻力作用）按浓度加权得到的，起初所有位置 w 均为 0，边界条件是最高处 w 恒为 0，这是由于达到最高处的烟尘必定是向上扩散而来，而我们不会涉及更高处，因此不会被给予向下的速度。

图 18 展示了 $W = 0.5, 3$ 时自适应重力更新的效果，而**图 19** 则为两种情况下 $w(z)$ 在迭代完成时的结果。由图片，迭代结束后浓度稀疏的部分较接近二次，而接近地面处则更接近线性结果。

图 18: 自适应系数的影响

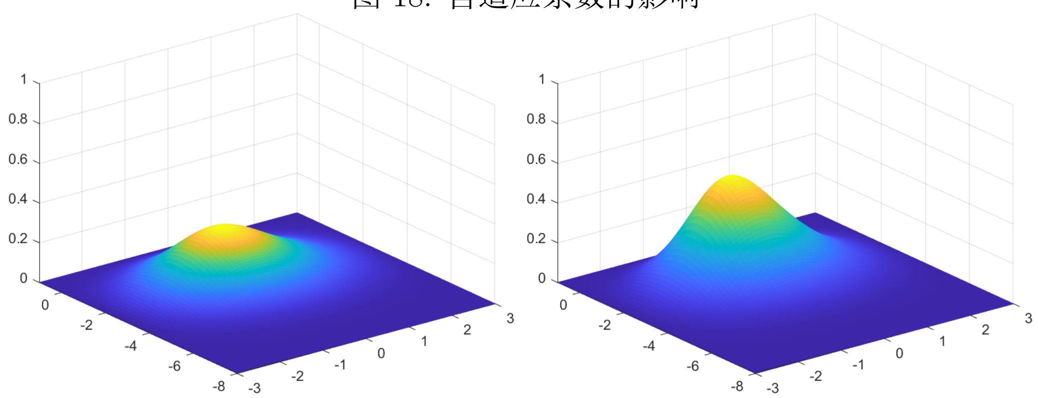
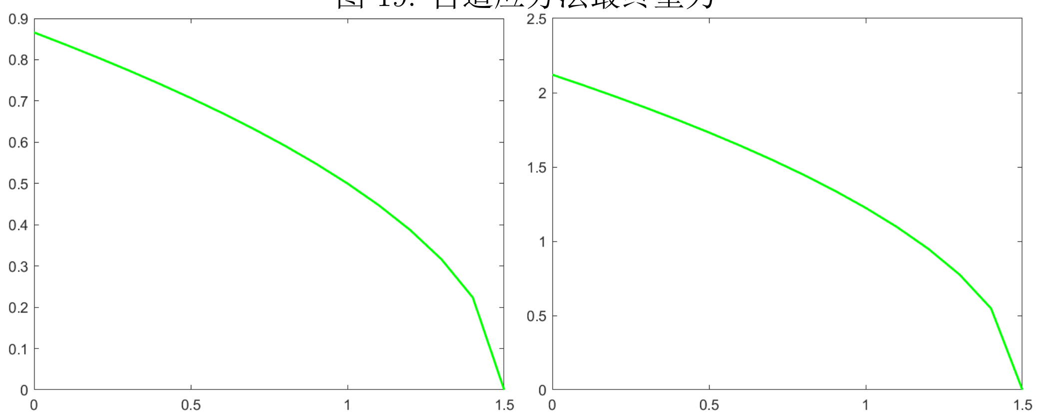


图 19: 自适应方法最终重力



由于自适应更新重力虽然效果较为准确，但开销相对高，在没有过高的效果需求时仍然采用恒定速度模型即可。除了考虑地面的复杂情况外，之后的模拟仍然采用恒定速度。

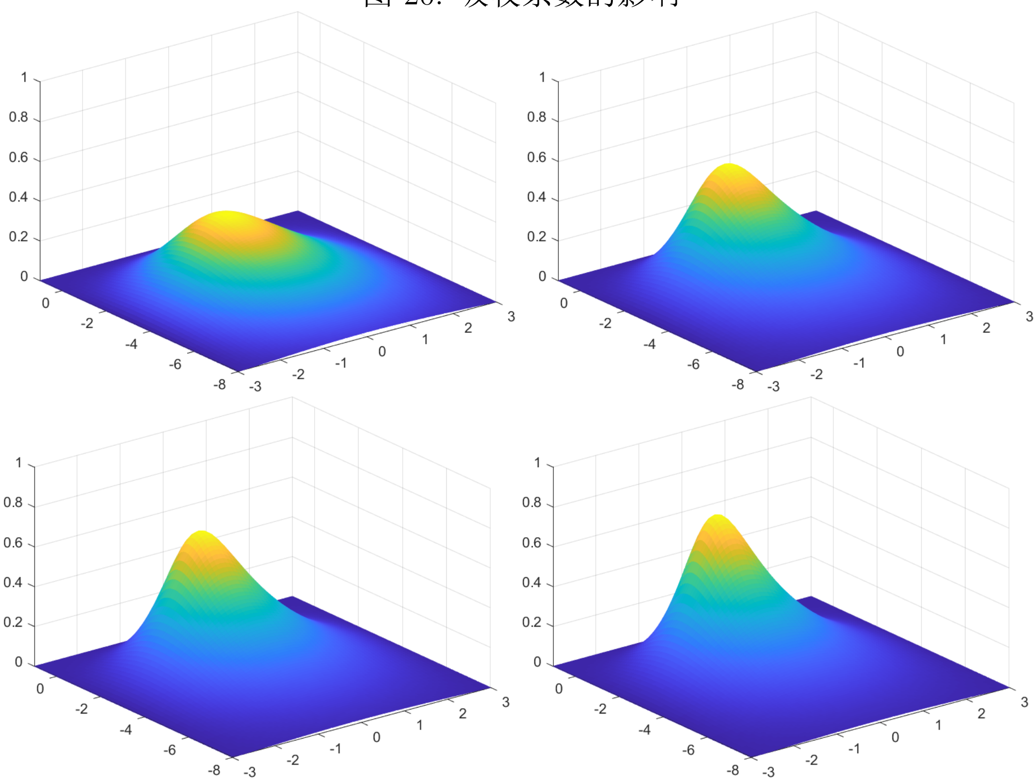
§6.3 地面边界

本部分将详细探讨地面情况与地形所产生的影响。由于对地面情况没有更多假设，我们认为地面只影响吸收系数，且各地的吸收系数恒定；对地形，我们通过 $s(x, y)$ 控制每处的高度，并进行针对性处理。

6.3.1 吸收系数的影响

首先，仍然采用式 (6.1) 所给出的地面边界处理。在给定了地面边界的条件时，我们便设定了 $\lambda = 0.5$，而实际的地面情况由于吸收、反射的不同会引起不同的 λ 值，产生如**图 20** 的效果，四张图 λ 分别为 0、0.25、0.5、1。

图 20: 吸收系数的影响



图中可以看出，吸收系数越低时，灰尘越倾向于远处扩散，且堆积的幅度更小，符合常识。将吸收系数对最大浓度、浓度中心的影响作出**图 21**、**图 22**，结果与刚才的推理相同。随着 λ 增大，曲线的斜率不断降低，直到基本达到 $\lambda = 1$ 时的堆积。

在地面情况更复杂时，也可以考虑将 λ 变为 $\lambda(x, y)$ 处理，或类似重力项增添随时间的更新。

图 21: 最大浓度随吸收系数变化

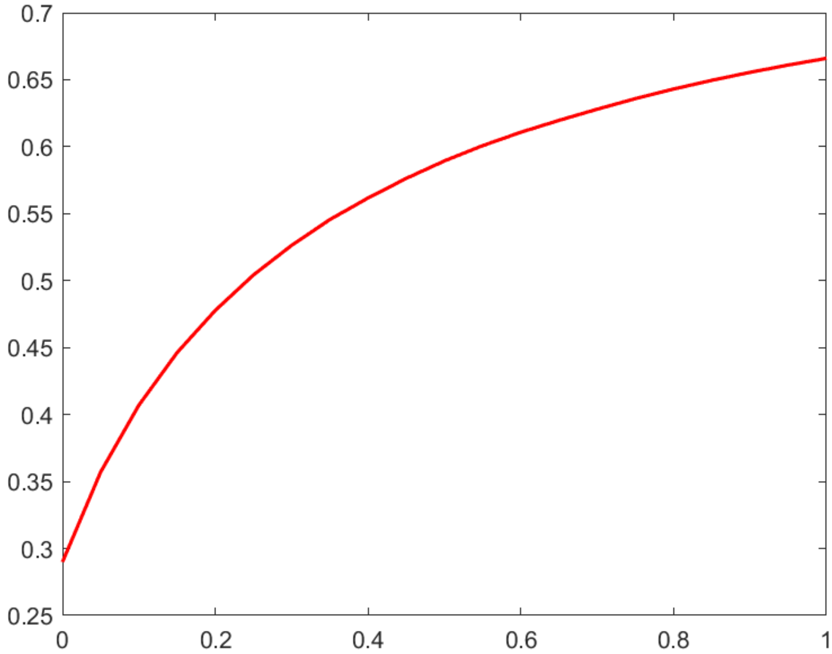
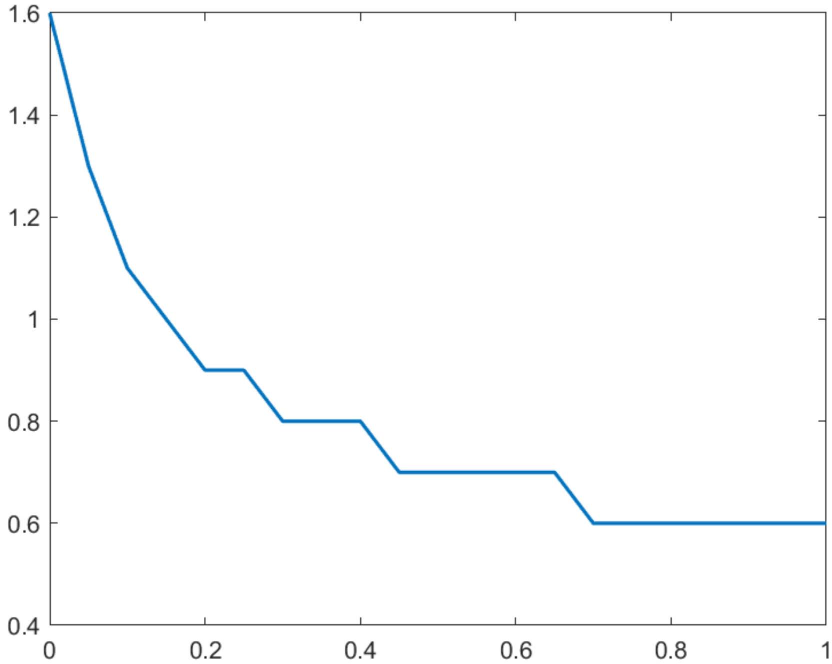


图 22: 浓度中心随吸收系数变化



6.3.2 蒙版法

在离散后，$s(x,y)$ 将转化为矩阵 S_{ij}，记录 (ih, jh) 处地面的高度在某个 z_k 的位置。严格来说，需要对每一个点进行更新，并且对应考虑上下左右是否为边界、何种边界，然后进行计算。

但是，我们采用 MATLAB 作为编程软件，逐点操作、判断的计算开销是比作为整体矩

阵的子矩阵卷积高很多的，因此，我们不希望破坏整体的对称性。此外，在模拟场景中，属于地面的格点相比属于空中的少很多，于是我们采用蒙版法：先按照之前的方式更新整体，再单独对蒙版内的地面格点进行处理，以满足地面的特殊边界条件。最终，我们每次返回的地表浓度为 $C^l_{ijS_{ij}}$。

对蒙版内的地面，我们的更新方式为：

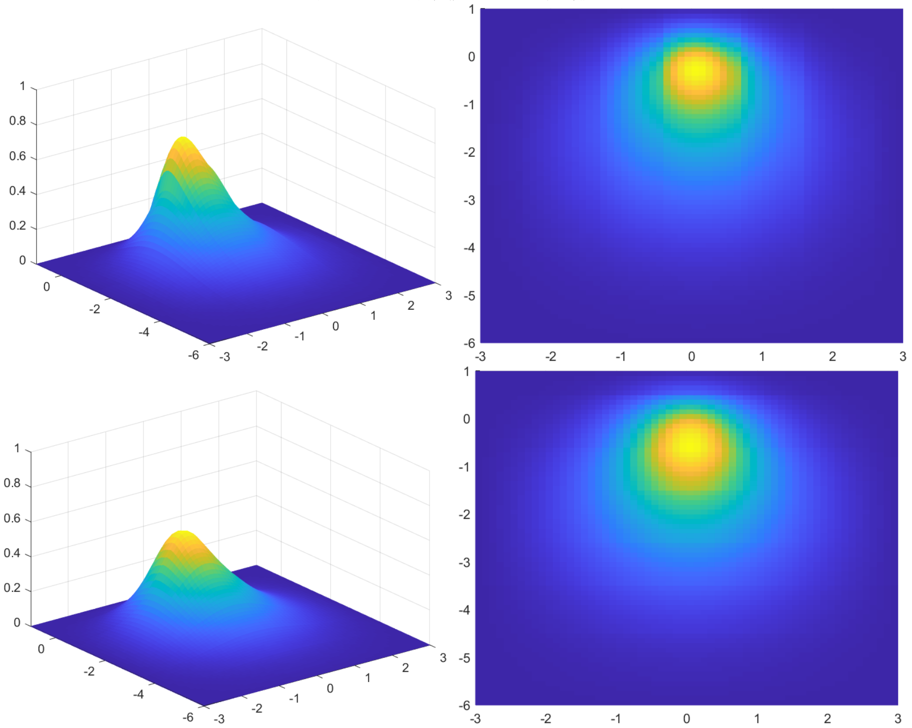
```
% manage ground
for a = 1:xs
    for b = 1:ys
        for k = S(a, b):-1:1
            count = 0;
            d1 = 0;
            d2 = 0;
            if k == S(a, b)
                count = count + 1;
                d1 = d1 + C(a, b, k + 1);
                d2 = d2 + C(a, b, k + 2);
            end
            if a < xs-1 && k > S(a + 1, b)
                count = count + 1;
                d1 = d1 + C(a + 1, b, k);
                d2 = d2 + C(a + 2, b, k);
            end
            if a > 2 && k > S(a - 1, b)
                count = count + 1;
                d1 = d1 + C(a - 1, b, k);
                d2 = d2 + C(a - 2, b, k);
            end
            if b < ys-1 && k > S(a, b + 1)
                count = count + 1;
                d1 = d1 + C(a, b + 1, k);
                d2 = d2 + C(a, b + 2, k);
            end
            if b > 2 && k > S(a, b - 1)
                count = count + 1;
                d1 = d1 + C(a, b - 1, k);
                d2 = d2 + C(a, b - 2, k);
```

```
            end
            if count == 0
                continue;
            end
            d1 = d1 / count;
            d2 = d2 / count;
            C(a, b, k) = (2 - lam) * d1 + (lam - 1) * d2;
        end
    end
end
```

更新公式仍然为 $(2-\lambda)d_1+(\lambda-1)d_2$，但这里 d_1, d_2 表示各个接触空气的方向距离 1、2 的 C 的平均（根据 $s(x,y)$ 的假设，地面不可能在下方接触空气）。若一个点各个方向都不接触空气，它并不会影响空气中浓度或地表浓度的更新（若 C_{ijk} 是表面，$C_{i+1,j,k}$ 是空气，则 $C_{i+2,j,k}$ 接触空气，不可能是内部，其他方向同理），因此可以保持 0。根据计算公式可以发现，若所有 $s(x,y)$ 均相等，地面每个点只有上方接触空气。

6.3.3 复杂情况

图 23: 斜坡上的扩散

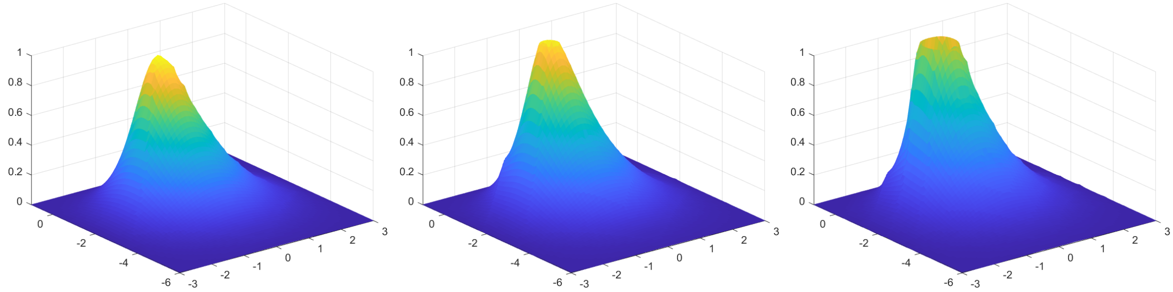


结合重力自适应更新与蒙版法计算地面影响后，我们可以处理各种复杂情况。例如图 **23** 表示的斜坡中的扩散。上方两张图为 $s(x,y)=\frac{y+3}{10}$ 上的扩散结果，下方则为 $s(x,y)=\frac{1-x}{10}$

上的扩散结果。可以看到，y 方向斜坡的影响下，浓度中心明显发生了偏移，而 x 方向逐渐上升的斜坡则是限制了浓度进一步向更远处传播。

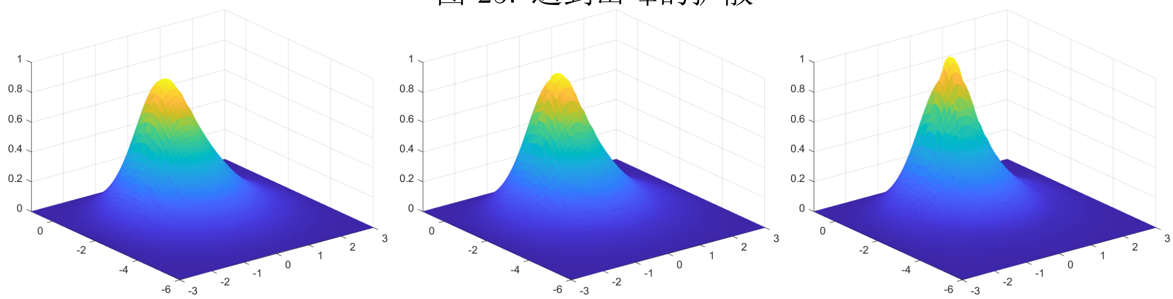
除了斜坡外，还有一些常见的地形。**图 24** 代表 $s(x,y)=c(|x+3|+|y|)$，$c=0.02,0.06,0.1$ 时的扩散。在现实中，这对应不同深度的山谷。在山谷越深时，烟尘越容易堆积在中心，因此总体浓度会随着深度增加而急剧上升。

图 24: 山谷中的扩散



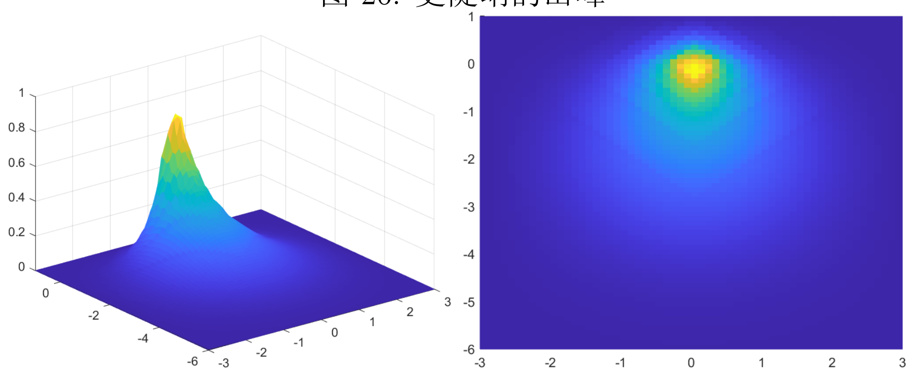
另一个情况如**图 25** ，是 $s(x,y)=c\max(4-(x+2.5)^2-y^2,0)$，$c=1/12,1/6,1/3$ 时的扩散，对应扩散过程中遇到山峰。可以发现，当山峰逐渐升高时，由于无法扩散过，烟尘会在山峰的表面堆积，形成偏离开原本浓度中心的堆积点。

图 25: 遇到山峰的扩散



当山峰高度变化很快（很陡）时，图像则会出现不同的边界，例如**图 26** 中，$s(x,y)=\mathrm{e}^{-|x|-|y|}$，中心的高度要远比周围高，导致烟尘扩散更远，而更不容易在地面堆积。

图 26: 更陡峭的山峰



七、 总结与讨论

§7.1 总结

7.1.1 效果实现

本文针对烟尘扩散问题，基于对流-扩散方程，建立了一个能够模拟烟尘扩散特征的模型，用于确定排放源周围地表的烟尘浓度。利用有限差分法，在特定边界条件下，求解对流-扩散方程，并结合自适应重力项更新与蒙版法边界处理，实现了在不同烟尘种类、不同排放高度、不同风速、不同地形等条件下，烟尘扩散浓度分布的模拟效果，得出了一些有效的结论。

本文中的二维情况适用于大规模、条件简单的情况下得到近似的稳态分布，而三维情况则可以模拟符合假设的理想情况下任何时间点的分布，通过迭代至稳定也可以得到稳态。出于个人电脑算力限制，我们并没有在大规模情况下求解三维稳态，不过根据理论收敛性，与实际的粗网格模拟情况，稳态分布是可以达成的。

此外，由于我们将所有对扩散的影响集中到了方程中的重力项、边界情况处理、初始分布选择与数值求解方法，可以在四个方面独立地进行优化与提升，增强模型的泛化性能。理论来说，只要四个方面都得到了充分的优化，在均匀烟尘的假设下即可充分逼近真实情况。

7.1.2 模型比较

本文实现的模型相较于传统的高斯扩散模型拉格朗日粒子模型与有如下优势：

1. 无需事先假设 yz 方向的分布，可以从初始分布开始模拟扩散；
2. 引入时间项，既可以对稳态进行估计也可以对瞬态进行处理；
3. 通过对浓度分布而非粒子的追踪，达到了个人电脑也可以模拟出基本现实情况的复杂度；
4. 引入地形与地面吸收率作为参数，可以充分考察地表的反射作用，并模拟不同地形的结果；
5. 引入可以输入或自适应更新的重力项，更好拟合重力对烟尘产生的影响；
6. 允许在不测量具体参数的情况下对烟尘分布情况进行基本准确的定性模拟。

作为权衡，本文的模型不如直接测量两方向空气稳定性后的高斯模型计算简单，也不如粒子级别的拉格朗日模型精确。不过，出于在准确度上对高斯模型，在复杂度上对拉格朗日粒子模型的直接改进，这样的结果是完全可以接受的。

§7.2 讨论

7.2.1 应用举例

本文实现的模型求解，可以应用到如下场景：

1. 模拟工厂烟囱排放的污染物在复杂的楼房地形中一定时间内的扩散情况，有利于工厂选址，提高周边居民健康水平；
2. 在发生突发性大气污染事故时，对污染扩散进行瞬态与稳态模拟分析，有利于减轻事故危害，降低人员伤亡和财产损失；
3. 由于对流扩散方程的普适性，还可用于工业、交通或其他区域的有限范围内气溶胶输运模拟。

总体来说，由于我们不需要过多的预先假设，在测量不方便进行时至少可以达到定性，也可以与真实测量结果对比印证，寻找未知的引起大气扰动的作用。在定量情况下，我们的模型可以给出很短时间的瞬态结果，找到浓度中心的变化规律，也能给出大气中污染扩散的规律，因此可以用于各种预测性的问题。

7.2.2 改进方向

该方法计算成本较高，需要对大量的气象数据以及诸多中间参数进行精细化求解，并且要求对此领域有较深的了解本文实现的方法能够对大气中较为复杂的物理过程进行比较准确地建模和描述，但也存在以下局限性：

1. 参数不确定性：模型需要依赖大量观测数据，并对其中的参数进行合理的设定和调整，而这些参数在实际情况下具有不确定性；
2. 数值局限性：并未给出解的解析形式，每次改变条件需要重新进行模拟获得当前解；
3. 精细化难度较高：模型完全依赖对流-扩散方程作为基本模型，但由于大气中存在着众多复杂的交互作用，如果在需要对其进行更精细化的，引入不能直接由浓度表示的项，难度就会较高；
4. 计算复杂性限制：虽然模型已经尽量降低了方程数值解的复杂度，但需要更加精确的场景，如需要更复杂的控制容积离散方式/无法避免直接求解 C-N 时，数值复杂不可避免；
5. 误差累积：虽然本文的方法在足够长时间内具有稳定性，但边界与数值计算造成的误差仍然会累计，从一维情况与精确解的误差就可以看出边界累积的情况。如果希望解决误差累积的问题，又势必要引入复杂度进行更大范围的模拟。

针对上述问题，未来改进方向可能但不限于：

1. 融合现场实验：开展实验观测，以获取更为准确的气象和污染物数据（例如重力的真实影响），并利用这些数据来进一步优化模型参数，寻找更准确的更新形式；
2. 拟合出解析结果：运用多项式、指数等函数拟合出浓度中心或最高浓度，乃至整个地表浓度分布随参数变化的解析结果，方便测量出参数后直接代入得到近似解；
3. 优化模型：考虑到更多相互作用，在模型方程中引入一些修正项进行修正，例如增添表示不同种类气体的相互作用项，达到对多种烟尘混合气体的联合模拟效果，而非简单叠加；
4. 优化算法：结合实验结果，在总结中提到的独立优化的四个部分进行更合适的设置，来增强精确性、降低复杂度，并加入与真实情况的差距作为模型的度量；
5. 引入学习：通过对现实结果的观察作为输入应用深度学习等方法，达到自适应的离散或参数选取，获得更符合现实的结果。

参考文献

[1] H. Dou, T. Ming, Z. Li, C. Peng, C. Zhang, and X. Fu, "Numerical simulation of pollutant dispersion characteristics in a three-dimensional urban traffic system," *Atmospheric Pollution Research*, vol. 9, no. 4, pp. 735–746, 2018.

[2] D. Yang, B. Guo, X. Ye, A. Yu, and J. Guo, "Numerical simulation of electrostatic precipitator considering the dust particle space charge," *Powder Technology*, vol. 354, pp. 552–560, 2019.

[3] Y. Tominaga and T. Stathopoulos, "Numerical simulation of dispersion around an isolated cubic building: Model evaluation of rans and les," *Building and Environment*, vol. 45, no. 10, pp. 2231–2239, 2010.

[4] 苑春莉, 范世良, 柴天昱, 朱玉芳, 谢元华, and 朱彤, "大气扩散模型的研究进展," *节能*, vol. 35, no. 10, p. 6, 2016.

[5] 宋伟伟, 黄明犬, 肖凯涛, and 王献, "随机游走粒子——烟团模式在烟幕扩散数值模拟中的应用," in *全国大气环境学术会议*, 2005.

[6] 吴清松, *计算热物理引论*. 中国科学技术大学出版社, 2009.

附录-文件列表

CN2D.m	二维C-N格式迭代
CN3D.m	三维基本C-N格式迭代
CN3D_all.m	包含自适应重力调整与复杂地形处理的三维C-N迭代
CN3D_return_pd.m	返回浓度中心与最大浓度变化的三维基本C-N迭代
CN3D_wsf.m	包含自适应重力调整的三维C-N迭代
CN3D_wz.m	包含手动输入重力函数的三维C-N迭代
FTCS1D.m	一维FTCS迭代
FTCS2D.m	二维FTCS迭代
show.m	主函数 [运行此函数会依次展示论文中提及的所有结果]
show_1D_border.m	展示一维各种边界处理对比
show_1D_gauss.m	展示一维正态分布初值的扩散基本效果
show_1D_unstable.m	展示一维数值不稳定的迭代结果
show_2D_CN.m	展示二维预估-校正C-N算法的稳定性
show_2D_FTCS.m	展示二维FCTS算法的效果
show_2D_stable.m	展示二维数值不稳定时C-N算法对稳定性的影响
show_3D.m	展示三维扩散基本结果
show_3D_D_U.m	展示不同D与U对三维扩散的影响并作图
show_3D_D_U_9.m	展示几个特定D与U对三维扩散的影响
show_3D_ground.m	展示地面情况对三维扩散的影响
show_3D_h.m	展示不同高度对三维扩散的影响
show_3D_lambda.m	展示不同吸收系数对三维扩散的影响并作图
show_3D_lambda_4.m	展示几个特定吸收系数对三维扩散的影响
show_3D_w.m	展示不同重力项对三维扩散的影响

使用方法：在文件目录下建立 figs 文件夹，运行 show 后，所有输出会输出到控制台或以 png/gif 的格式输出进 figs，运行后 figs 总大小约 216MB。