

气相和微颗粒污染物在城市环境中的传输扩散

谢正桐^{1,†} 廖俊豪² 蔡晓鸣³

¹ Faculty of Engineering and the Environment, University of Southampton, UK

² Department of Mechanical Engineering, University of Hong Kong, HK, China

³ School of Geography, Earth and Environmental Sciences, University of Birmingham, UK

摘 要 城市大气边界层中污染物传输扩散, 包括气相和微颗粒 (PM), 是一个日益关注的问题. 本文结合笔者及合著者近些年的工作, 试图综述在这方面研究的最新进展. 主要包括: 天气尺度 (meso-scale) 和街道尺度耦合的大涡模拟, 温度稳定性层结效应, 高层建筑的影响, 在极端天气下的污染物浓度极值的预报, 化学反应和湍流的耦合计算和气溶胶动力学过程. 本文侧重于介绍英国和欧洲的数值模型研究的进展情况.

关键词 天气尺度, 温度稳定性, 极端天气, 污染浓度极值, 街道峡谷模型, 化学反应, 耦合计算

中图分类号: O355 文献标识码: A DOI: 10.6052/1000-0992-15-008

收稿日期: 2015-02-03; 录用日期: 2015-07-15; 在线出版日期: 2015-07-23

[†] E-mail: z.xie@soton.ac.uk

引用方式: 谢正桐, 廖俊豪, 蔡晓鸣. 气相和微颗粒污染物在城市环境中的传输扩散. 力学进展, 2015, 45: 201510

Xie Z T, Liu C H, Cai X M. Modelling gas and PM pollutant dispersion in urban environments. *Advances in Mechanics*, 2015, 45: 201510

© 2015《力学进展》版权所有

1 引 言

目前, 大约 54% 的世界人口居住在城市, 到 2050 年这个比例将提高到 66%。伴随着越来越多的建筑物 (包括高层建筑) 在城市中建成, 城市消耗了世界能源的 75%, 生产全球 80% 的二氧化碳 (CO_2)。城市大气边界层中污染物和热传输扩散是一个日益关注的问题。在发展中国家, 譬如中国和印度, 由于快速的城市化和高速的工业发展, 空气质量已成了公众十分关切且亟待解决的严重问题。在中国, 普通公众几乎每天感同身受, 其重要性无需强调。

在发达国家, 大众对空气质量有了更高的要求。20 世纪 50 年代在伦敦出现过灾难性的大气污染事故以后, 英国大力解决这个问题, 已经取得了很好的成效。但是, 英国的能源消耗和空气污染仍然是至关重要的问题。在英国城市中, 能源消费总量的 40% 用于建筑物内的加热和冷却, 这也极大地影响了整个城市的空气质量。对于建筑物热效率的微小改善, 就可以大量节省能源, 减少排放, 提高空气质量。此外, 英国设定了在 2010 年到 2020 年期间年平均 $\text{PM}_{2.5}$ 浓度降低 15% 的目标。这是一个极具挑战性的目标。

在过去的半个世纪中, 欧洲国家已经成功降低了大陆和区域尺度上空气污染 (如冬季或夏季雾霾) 的出现频率和污染程度。最近研究的焦点之一转移到了城市冠层 (UCL) 尺度 (或街道尺度) 的空气质量问题上。在“英格兰, 苏格兰, 威尔士和北爱尔兰的空气质量战略 2008”会议上, 人们认识到, 虽然在 1997 至 2003 年 PM_{10} 排放量持续显著下降, 但是城市 PM_{10} 的空气浓度并没有相应下降。此外, 城市 NO_2 空气浓度也没有像 NO 浓度那样快速下降, 这样 NO_2/NO_x 的浓度比率增加了。在城市冠层 (UCL) 里, 来自汽车尾气排放的 NO_x 通常较高, 臭氧可和排放的 NO_x 滴定, 但是含量通常较低。然而, NO_2 和颗粒物浓度 (PM) 包括超微颗粒 (UFP) 通常比那些测量的城市背景浓度更高。以 2005 年为例, 在伦敦市中心 Marylebone Rd 和 Gloucester Pl 的 DAPPLE 试验现场测得的数据显示, 可吸入颗粒物浓度超过了年平均目标值 $44\mu\text{g}/\text{m}^3$, PM_{10} 24h 平均浓度超标多于 35d, 并且 NO_2 1h 平均浓度超过目标值为 853 次。人们认识到, 城市冠层是城市大部分户外活动发生的地方, 也是大量的个体吸收空气污染物之地, 例如行人, 道路使用者和邻近建筑物居住者——他们需从室外街道环境获得室内通气。

另外一个原因是基于安全和公众健康方面的考虑。在城市环境或工业区中, 危险化学品意外事故 (或恐怖活动) 导致的有毒气体在大气中的释放, 潜在地对国土安全和公众健康构成非常大的威胁。其中一个关键是要能够建立预报模型, 该模型能够迅速地 (即快于“实时”), 可靠地, 预报从局部源到短距离内 (小于 1km, 在该范围内

对人类健康的威胁是最大的) 大气中的有毒气体的扩散情况, 以告知决策者, 指导疏散等等. 然而, 因为我们的理解和模拟短程扩散过程的能力还非常有限, 当前的预报模式在这个范围内恰恰是最不可靠的. 现阶段一个折中的方法是, 把计算流体动力学 (CFD) 针对某个特定城市 (或区域) 几何形状的数值结果进行适当地参数化, 结合高度简化的污染物传输扩散模型, 譬如, CT-Analyst 模型 (Boris et al. 2011), 街道网络模型 (Street Network Model, Soulhac et al. 2011) 进行预报. CT-Analyst 模型已经用于德国汉堡市的消防队的日常工作和训练. 在英国工程与物理科学基金会 (EPSRC) 的支持下, 笔者和同事们也正在发展这方面的模式 “DIPLOS” (www.diplos.org).

这些需要对污染物传输扩散的机理以及物理和化学反应过程有较好的了解. 第一个原因是问题的物理复杂性. 例如, 天气尺度的风场变化对污染物扩散肯定会产生不可忽视的影响. 如何使用这些大尺度的风场变化作为计算流体动力学 (CFD) 的边界条件, 以及如何评估这些设定的不确定性是一个很大问题. 温度变化的浮力效应也可能是不可忽略的因素, 特别是在静风的时候. 模拟建筑物和地面的表面粗糙度的影响, 以及评估其不确定性是另一个困难的. 湍流模拟仍然是困难的. 另外, 辐射的影响在某些情况下是不可忽略的. 第二个原因是化学过程和湍流的耦合作用而导致的复杂性. NO_2 和超微颗粒 (UFP) 的产生/消耗的相关物理与化学过程是快速的 (分钟量级). 这些高度非线性过程的时间尺度和城市冠层 (UCL) 中的湍流尺度大约相同. 因此, 耦合研究对于发展一个三维数值模型至关重要.

近些年来, 计算机的软硬件都发展很快, 但是如何提高数值模型的计算效率仍然是极其重要的课题. 例如, 为了预测在城市环境或工业场所的近程 (例如在 1 km 范围内) 污染物扩散, 在要求模拟建筑物形状的条件下, CFD 模拟的分辨率要求是 1 m 量级. 这在计算上是十分昂贵的. 考虑三维情况使用均匀网格, 则网格数是 10^9 量级. 因为这种流动本质上是非定常的, 同时污染物云团的传输也是高度非定常的, 大涡模拟 (LES) 比雷诺平均方法 (RANS), 如 $K-\epsilon$ 湍流模型更准确. 但是, 使用 LES 是更具挑战性, 例如, LES 对计算机资源的要求更高. 可能是由于这些原因, 迄今可用于比较的基准 LES 算例还是很少. 另外一个例子是, PM_{10} 和 $\text{PM}_{2.5}$ 的凝结 (coagulation) 和冷凝 (condensation) /蒸发 (evaporation) 的时间尺度, 至少是数小时的量级 (Ketzel & Berkowicz 2004), 远大于一个排放的空气云团的在 UCL 内的滞留时间 (分钟量级). 对于在化学过程中考虑中期和长期寿命的化学物质 (如 NO , NO_2 , O_3 和 CO), Bright 等 (2013) 在数值积分中使用了 0.01 s 时间步长. 而对于短期寿命的化学物质 (如 OH , HO_2 和 RO_2), 采用 0.001 s 时间步长. 可见, 这个问题的时间尺度的跨度大于 10^6 . 计算预测所有的这些尺度的物理化学过程会是极其昂贵的, 甚至是不可能的. 如何折中考虑使用现有的计算和试验能力以解决紧迫的问题, 是这篇综述的重点中的重点.

在这篇综述中, 第 2 节介绍研究技术现状, 主要着眼于我们近来发展的基于牛顿

流体的数值环境风洞 (Numerical Environmental Wind Tunnel of Newtonian fluid, NEWTON) 在气相污染物传输扩散中的应用, 简要回顾了 NEWTON 的特点和最新进展; 第 3 节介绍了一些简单的城市建筑物模型; 第 4 节介绍了天气尺度风变化对湍流和污染物扩散的影响, 以及讨论 LES 和中尺度程序的耦合计算的必要性; 第 5 节介绍了温度稳定层结的影响; 第 6 节简要讨论了极端条件下的极端污染物浓度; 第 7 节综述了化学反应和湍流的耦合计算, 以及气溶胶动力学过程; 第 8 节是对于解决城市尺度大气污染问题的讨论和展望.

2 研究技术现状

因为快速增长的模拟能力和降低的成本, 计算流体动力学 (CFD) 越来越具有吸引力. 在以上提到的应用背景上, 我们集成了这些年的技术, 发展了基于牛顿流体的数值环境风洞 (NEWTON). 后续我们将简要回顾一下几个案例/工况研究, 以展示其现在的能力和潜在的用途.

我们为什么需要设计环境风洞? 物理/数值模拟大气边界层 (ABL) 不是一个容易的课题. 在这里, 我们打算讨论设计物理环境风洞 (Physical Environmental Wind Tunnel, PEWT) 的细节, 只简要介绍两个著名的物理环境风洞以说明物理模拟 ABL 的挑战性.

第一个是在萨里大学的 EnFlo 风洞. 该风洞拥有全面集成的入口风速剖面控制, 风洞底部表面加热和冷却系统能够用于产生中性的、稳定的和不稳定的边界层 (http://portal.surrey.ac.uk/portal/page?_pageid=822,364197&_dad=portal&_schema=PORTAL). 图 1 是 EnFlo 风洞的示意图.

第二个是在汉堡大学气象研究所的多层风洞 (见 图 2), 在入口布置有 9 个风扇, 在地板上有若干二维粗糙度单元. 该风洞成功地产生了较厚的近地层 (即几乎到一半边界层的高度), 以方便评估高层建筑周围的环境情况 (Richards et al. 2006), 另参见 图 3.

关于计算流体动力学对环境流的模拟, 这里列出了一些非常好的综述, 例如 Baker (2007)、Cochran 和 Derickson (2011)、Bocken (2013)、Wright 和 Hargreaves (2013)、崔桂香等 (2013). 这些综述侧重各异. 其中 Bocken(2013) 特别明确强调了数值风洞的重要性. 崔桂香等 (2013) 强调了针对中国城市大气环境的问题.

重点针对局地流动环境, 我们特别发展了基于牛顿流体的环境数值风洞 (NEWTON). 虽然它在许多方面和计算风工程 (CWE) 类似, 但 NEWTON 更侧重于环境流体力学的问题, 如城市环境, 地形特征, 污染物的扩散和热层结效应. 简单地说, NEWTON 是一个系统综合集成的工具. 它集成了我们近来发展的湍流的入口条件, 粗糙固

壁模型, 模拟热层结和天气尺度风场变化的影响等技术. 它使用计算流体力学, 主要模拟物理环境风洞 (PEWT) 的模型尺度 (即 1 m 量级) 的问题. 但并不局限于此, 例如 NEWTON 可以模拟天气尺度风场的变化的影响.

NEWTON 可以应用于: (1) 在城市环境中涉及公共安全性和国家安全性的问题, 例如意外事故/恐怖事件的污染物或有毒气体的扩散; (2) 风工程问题, 例如高层建筑的风载和行人舒适度, 大跨度桥梁的空气动力学; (3) 风能, 例如风机空气动力学;

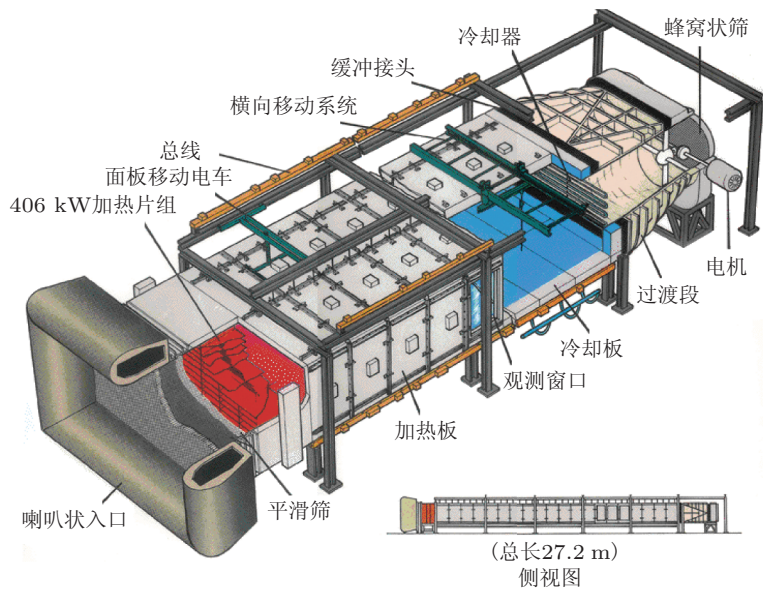


图 1

在萨里大学 EnFlo 实验室的气象风洞



图 2

在汉堡大学气象研究所的多层风洞 (Richards et al. 2006)

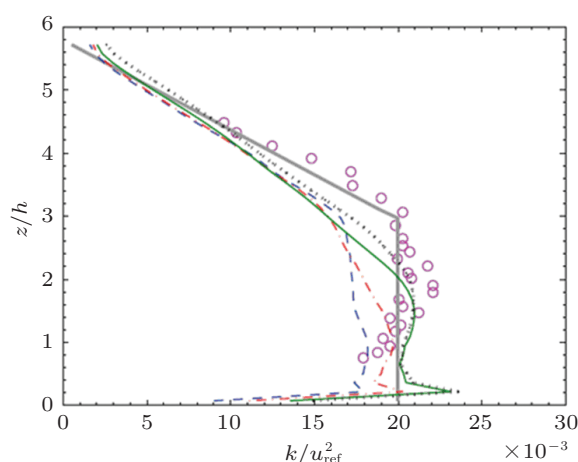


图 3

近地层湍流动能 (TKE) 沿高度分布. 圆圈符号: 实验 (Richards et al. 2006); 其他符号: LES (Boppa et al. 2013)

(4) 天气尺度问题, 例如参数化非中性层结下城市环境边界层的动量和热输运, 用于中尺度 (天气) 模式和街道尺度流场的耦合问题; (5) 如果假定 PM_{10} 和 $PM_{2.5}$ 在 UCL 的传输过程中其凝结和冷凝/蒸发忽略不计 (“惰性”), 则可以考虑为被动标量进行计算.

2.1 NEWTON 简介

Wright 和 Hargreaves (2013) 列出了 NEWTON 的 5 个特点 (注意在其论文中没有明确提到 NEWTON, 而是用到 “计算流体力学在环境问题中的应用”): (1) 可以做现场全尺度 (full-scale) 模拟; (2) 可以在实测数据之间进行插值, 补充实测数据 (实测数据往往是不密集的); (3) 极好的可视化; (4) 极好的可重复性; (5) 可以仿真模拟在实际现场不可能进行的试验, 如剧毒气体在自然大气环境中的释放和扩散. 特点 (1) 可能被认为还只是一个潜在的功能, 主要因为目前的计算机资源和软件技术的限制. 在下文中将要展开讨论这点.

具体地说, NEWTON 能够模拟对 PEWT 来说极其困难的或不可能的工况, 例如: 高度稳定/不稳定热层结情况 (Blocken 2013) 和超大型的流场 (10km 量级). 但小尺度 (1m 量级) 是至关重要的, 例如: 大跨度桥梁跨越大峡谷的流场和城市尺度的大气污染物的传输扩散; 风场的天气尺度不定常变化对一些物理过程有极其重要的影响, 如污染物在城市的环境中扩散传输; 大尺度气象事件, 如龙卷风等.

2.2 NEWTON 面临的挑战

Wright 和 Hargreaves (2013) 指出了 NEWTON 的 2 个缺点或问题: (1) CFD 针对

一个特定的流体流问题的输出结果不一定是有效 (或正确的); (2) 针对 CFD 模型的验证或校准, 已经有一些指南可供使用. 但是在某些情况下, 可能没有数据可用于验证或校准 CFD 模型. 在这种情况下 CFD 的使用者必须谨慎, 不要对 CFD 结果做过度大胆的解释和使用.

Murakami (1998) 列出了 4 个方面的挑战: (1) 三维流动 (包括冲击, 分离与旋涡脱落) 的复杂性; (2) 绕尖角的流动和处理相应的离散化方案的困难; (3) 入口边界条件, 这对于大涡模拟 (LES) 特别具有挑战性; (4) 高雷诺数流动, 如靠近固壁处理. 但是, 考虑 NEWTON 使用大涡模拟 (LES) 而不是雷诺平均的方法 (RANS), (1) 和 (2) 或许不是问题了.

NEWTON 针对于城市环境中的颗粒和气相污染物传输扩散应用方面, 面临的一个最大的挑战是计算效率问题, 即如何在一定的时间期限内完成最低限度计算精度的数值模拟. Cochran 和 Derickson (2011) 评论说, “……继续混合使用风洞和 CFD, 并且在 CFD 与风洞数据 (或全尺度实测数据) 之间的进行交叉对比验证将是至关重要的提高信心的方法”. 实测数据的使用, 还可以帮助建立混合 (hybrid) 和耦合 (coupling) 的数值模型, 在计算效率和精度上得到折中的有效的数值预报.

2.3 NEWTON 的前景

Baker (2007) 和 Blocken (2013) 对计算风工程 (CWE) 作了极好的评价, 其中大多数也适用于 NEWTON. Baker (2007) 预测 “……在将来, 计算流体力学方法会持续增加地用于风场环境预测, 并用来预测中长期风载. 与此同时边界层风洞的使用将相应地下降……这些趋势很可能导致未来数十年边界层风洞将集中到数量较少的研究单位用于复杂结构的试验”. Blocken (2013) 的结论是, “CWE 已经走过了很长的路. 虽然还有很长的路要走, 过去 50 年的显著进步预示了它有一个光明的未来”.

Wright 和 Hargreaves (2013) 也有同样的观点: “虽然关于使用 CFD 仍然还有许多保留意见, CFD 已经被确立为一种工程工具. 其应用将会是越来越普通的技术.” 他们特别强调 “大涡模拟提供对湍流更真实的描述.”

在 2014 年国际风工程学会举办的第 6 届计算风工程国际学术研讨会上, 8 个大会报告中的 3 个报告建议或讨论到天气尺度 (中尺度) 和街道尺度 (微尺度, 或城市冠层 (UCL) 尺度) 的耦合计算; 其中有 12 个口头报告汇报了这方面的研究工作. Tamura 和 Pham Van (2014) 在大会报告中特别强调 “中尺度气象模型 (例如 WRF, The Weather Research and Forecasting: <http://wrf-model.org>) 和 LES 的杂交使用, 将是研究各种城市防灾问题和环境问题, 预测城市环境中脉动风场的一个非常有前途的工具.” 现在比较普遍的是使用嵌套网格 (往往使用多层嵌套逐级提高分辨率) 耦合上游的中尺度气象模型到下游的街道尺度的 LES. 这样网格的分辨率从 1km 量级过度到 10m 甚至

1 m 的量级, 后者则是能够分辨湍流运动的网格. 人们发现在某个嵌套的界面上会产生所谓的“spin-up”效应. 这种效应很可能仅仅是一种数值上的不真实的现象, 因此是必须避免的. 我们相信在嵌套界面上加入合适的湍流运动可以避免“spin-up”效应.

2.4 NEWTON 的进展

在使用非定常雷诺平均纳维 – 斯托克斯 (URANS) 方法时, 我们往往隐含地假定在非定常流动的时间尺度和实际的湍流时间尺度之间存在一个尺度空隙. 然而, 在实际流动中很难找到一个明显的尺度空隙. 这是使用 URANS 时一个固有的困难, 因此产生很多无法避免的问题. 相反, LES 只对小于亚网格尺度 (SGS) 的湍流建立模型来解析大尺度的湍流运动. 因为亚网格尺度的流体运动不受边界条件的影响, 因此 LES 方法比 URANS 方法更普适, 更准确.

我们的研究主要集中在 LES 和混合/杂交 LES (即 URANS 和 LES 的组合). 我们最近开发的技术主要针对在 2.1.2 节中 NEWTON 的挑战性课题, 即湍流的入口条件、粗糙固壁模型、模拟热层结和天气尺度风场变化的影响. 这些列示如下.

(1) 一个快速的入口湍流产生方法 (Xie & Castro 2008) 及其在城市环境中的污染物扩散预报中的应用 (Xie & Castro 2009). 这个方法保证了在计算域入口或者 URANS 和 LES 的界面处湍流涡的快速生成. 生成的湍流涡满足给定的空间和时间的湍流积分尺度和雷诺应力张量.

(2) 一个简单的粗糙固壁模型 (Xie et al. 2004) 及其在高层建筑绕流和传热中的应用 (Boppa et al. 2013). 乡村和城市大气边界层的下垫面都是粗糙的. 在计算上分辨每个粗糙单元 (例如灌木), 是一个不可能完成的任务. 我们建立的粗糙固壁模型对这些粗糙单元进行参数化, 对湍流平均场和脉动场进行准确模拟.

(3) 一个零散度的入口湍流产生方法 (Kim et al. 2013) 及其在高层建筑表面压力脉动和峰值风载计算中的应用 (Daniels et al. 2013). 这个是对我们以前方法 (Xie & Castro 2008) 的改进.

(4) 一个耦合计算天气尺度和街道尺度流场的方法 (Xie 2011, Xie et al. 2013)——在嵌套网格的界面上插入零散度的湍流脉动. 该方法可望避免所谓的“spin-up”效应. 由于计算机的快速发展, 极高分辨率的数值天气预报模型 (NWP VHR) 连续多次使用嵌套网格的办法, 分辨率从日常的天气预报网格尺寸 (1 km 量级) 到小于百米的量级. 由于这样的分辨率在湍流谱上落入携能涡频率范围, 嵌套网格界面下游出现非物理性质的流体运动 (即所谓“spin-up”). 在嵌套网格的界面使用入口湍流生成的方法 (Kim et al. 2013) 直接产生适当的湍流运动, 可以避免这样的问题.

(5) 一个模拟热层结对流场和污染物扩散影响的方法 (Xie et al. 2013; Boppa et al. 2010, 2013, 2014). 热层结, 特别是稳定性的热层结对于城市环境内极端污染物浓度

有极其重要的影响, 该方法可以直接用于这方面的研究.

现阶段对于城市环境的数值模拟可以归纳为 3 类. (1) 数值天气预报模型 (例如 WRF) 使用嵌套网格方法到 100 m 量级分辨率, 但是不分辨解析建筑物的几何形状; (2) 采用工程应用程序里的大涡模拟方法计算 10 km 量级的城市规模的区域, 在重要的区域使用高分辨率网格 (10 m 量级), 而在其余区域使用更粗糙的分辨率. 这两种方法都不能解析在城市街道内的携能涡. 但是这些湍流涡对于街道内污染物扩散和传热是至关重要的过程. 对于这些过程的忽略, 极大地降低了城市冠层内流动, 污染物扩散和传热的模拟精度; (3) 采用工程应用程序里的大涡模拟方法计算城市邻里尺度 (1 km 量级) 的区域, 分辨解析建筑物, 网格分辨率高达 1 m. 这些包括作者近期的伦敦市中心 DAPPLE 试验场的模拟计算. 一般认为邻里规模在空间尺度上已经足够大了, 该尺度综合了城市的几何特征, 因此在这个尺度上可以进行参数化——譬如用于对天气预报模式的边界输入. 然而, 把一个城市区域 (10 km 量级) 划分为数百个邻里尺度 (1 km 量级) 的计算域是非常具有挑战性的, 特别是贯穿城市的河流、湖泊宽度与邻里尺度相比在同一个数量级上. NEWTON 的近期目标是能够模拟整个城市尺度, 网格分辨率到 1 m. 这样避免了上面所列的所有问题. 并行计算机能力的高速发展使这个目标成为可能.

3 简单理想的城市建筑物群

从简单理想化的建筑物几何现状可以简化问题, 抓住本质. 一个比较普遍使用的简单模型是二维城市峡谷模型 (street canyon model), 譬如 Baker 等 (2004) 和 Chung 等 (2013). 这个模型适合城市中心比较规则的街道. 3.1 节和 3.2 节着重讨论一组有正方形底座的建筑物模型; 3.3 节讨论相对独立的高层建筑物模型. 前者适合模拟相对宽松的远离市中心的城市区域, 后者适合模拟市中心商业区 (CBD). Hang 和 Li (2012) 针对香港密集的高层建筑的具体情况, 把整个城市区域简化成一个多孔介质, 这样极大地简化了模型和计算, 具有启发性.

3.1 简单理想的城市建筑物群流场

Xie 等 (2008) 用于计算的建筑物阵列选择了 Cheng 和 Castro (2002) 的风洞实验模型. 图 4 和图 5 展示了一个“重复单元”, 尺寸为 80 mm × 80 mm. 每个单元包含 16 个底部尺寸为 10 mm × 10 mm 的建筑模型, 这些建筑模型的高度变化满足正态分布, 平均高度 $h = 10$ mm, 高度的标准偏差为约 3 mm, 平面覆盖率为 25%, 计算域的高度为 $10h$, 其中共有 4 个重复单元. 在水平方向 (即流向和展向) 使用周期性边界条件. 在计算域顶部采用剪切力为零的滑移壁面边界条件. 其他边界采用无滑移壁面条件. 需要强调的是, 这种有尖角的建筑物群绕流对雷诺数 (Re) 不敏感 (Xie & Castro 2006).

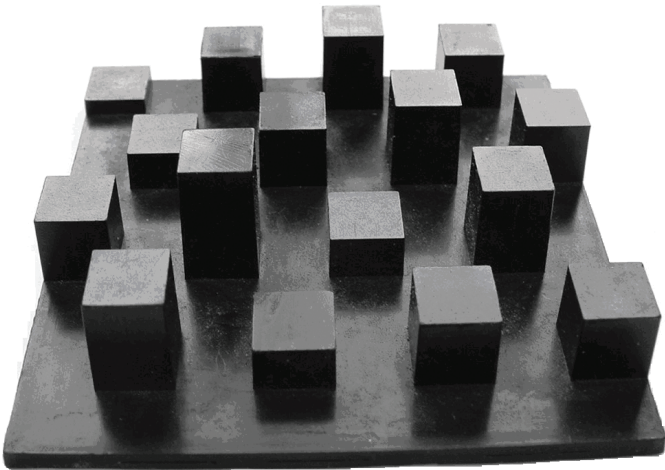


图 4

风洞实验中所使用的一个重复单元. 风场流向是从图顶部到底部

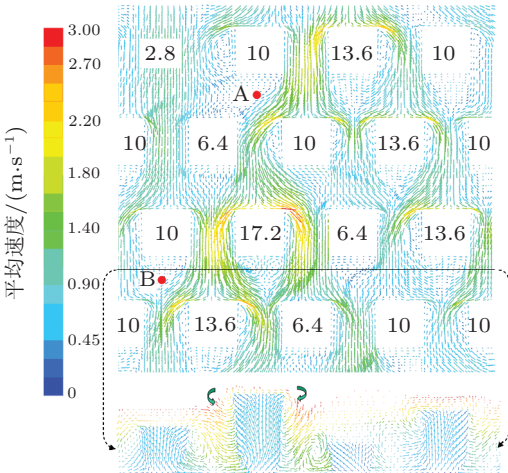


图 5

在 $z = 0.5h$ 高度上时间平均速度矢量 (U, V) (上图, 风流是从顶部到底部) 和在 $x = 5.6h$ 平均速度矢量 (V, W) , (下图, 面向上游). 每个建筑模型上的数字为其高度 (mm). U, V, W , 为流向、横向和垂直方向平均速度. 彩色条为平均速度幅值 (m/s)

计算网格为 3 个层次的多面体网格 (130 万个网格), 在近壁区每 $h \times h \times h$ 体积内有 $13 \times 13 \times 13$ 个网格. 采用了 STAR-CD v4 软件计算. 对于复杂几何形状的模拟, 多面体网格相对其他网格更具灵活性, 占用更小的内存. 为得到较准确的 LES 结果, Xie 和 Castro (2006) 建议在建筑物群冠层内网格尺寸不应超过 $0.06h$.

图 5 显示了在水平面 $z = 0.5h$ 上时间平均速度矢量 (U, V) 和竖直面 $x = 5.6h$ (紧接第 3 行建筑模型后面) 上平均速度矢量 (V, W)。在建筑物冠层内, 即使平均流动细节也是非常复杂的。这些在很大程度上依赖于建筑物排列和高度的分布。例如, 在第 1 行右侧 (面向下游) 10 mm 的建筑物的右边有一个大的分离涡, 而在左边不存在明显的分离涡。因为在该建筑物的左边是一个相对较高的 13.6 mm 的建筑物, 在这两个建筑物之间形成一个相对狭窄的通道, 在顺流方向上形成了较强的负压力梯度, 从而抑制了反向分离流动。与此相反, 在直接下游的一个 10 mm 的建筑物模型的两侧都存在明显的分离涡。

在垂直平面 $x = 5.6h$ 中, 一个普遍的现象是, 在建筑物之间的间隙 (街道) 中流动是向下的。因此在 17.2 mm 建筑物模型的右侧 (面向上游) 形成了一个顺时针的大涡, 如图大箭头所示。这和一个单独的高层建筑物所生成的涡的旋转方向刚好相反。其原因是在建筑物之间间隙的下游存在强劲的朝向地面的风流, 譬如在 17.2 mm 建筑物模型的右侧 (面向下游), 因为下游 13.6 mm 的建筑物模型的阻碍, 风流从而转向地面。这些结果再次揭示了建筑物群内的风场是非常复杂的。把现有数据推断用于新的工况时 (例如新的建筑物几何形状), 我们必须非常地谨慎。

Xie 等 (2008) 比较了上面的建筑群和等高的立方体形状的建筑群 (Xie & Castro 2006) 的流场, Xie 等 (2008) 发现它们的湍流统计特征显著不同, 特别是在建筑物群冠盖内和在冠盖以上的临近流场。这也许并不奇怪。另外 Xie 等 (2008) 还发现, 最高层建筑对总阻力的贡献远远超过其对总迎风面积的贡献, 因此对高层建筑附近的流动的需要特别的关注。

3.2 城市建筑物群内地表面源的污染物扩散

街道地面和建筑物表面的热传输扩散可以简化为一个面源的问题。这里认为在一定条件下, 浮力效应很小, 可以忽略。

Boppa 等 (2010) 使用大涡模拟研究了城市建筑物群内地表面源的污染物的扩散, 并且和 Pascheke 等 (2008) 风洞实验结果进行了比较。图 6 展示了随机高度建筑物群的三维视图。这里有 4 个图 4 所示的重复单元。地面上的被动标量面源由蓝色阴影区域表示 (即蔡涂层)。在风洞实验中 (Pascheke et al. 2008), 蔡涂层分布在一个重复单元的地表面上 (即 $z = 0$ 处)。在 LES 的研究中, Boppa 等 (2010) 采用了相同的设定。湍流计算的边界条件和 3.1 节相同。但是对于被动标量的边界条件, 进行了特殊的处理。简单地说, 面源处采用定值, 入口采用 0 标量值。计算域顶部、建筑物表面和其他地面处使用不可穿透边界条件。Boppa 等 (2010) 还同时模拟了等高建筑物群的情况 (C10S)。但是其他设置和随机高度建筑物群的设置相同 (RM10S)。

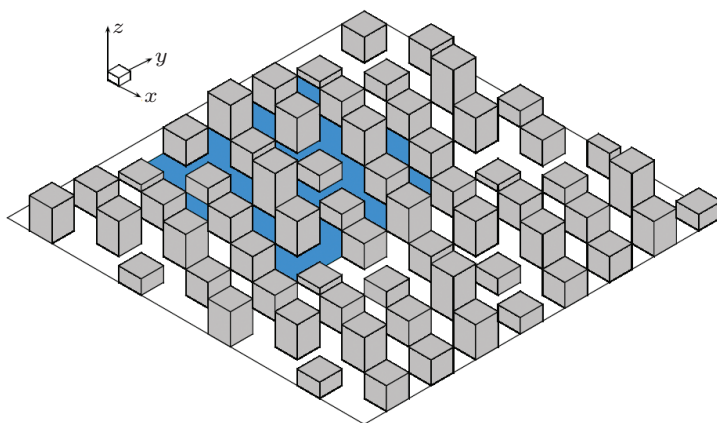


图 6

建筑物群的三维视图. 这里有 4 个图 4 所示的重复单元. 地面上的被动标量面源由蓝色阴影区域表示

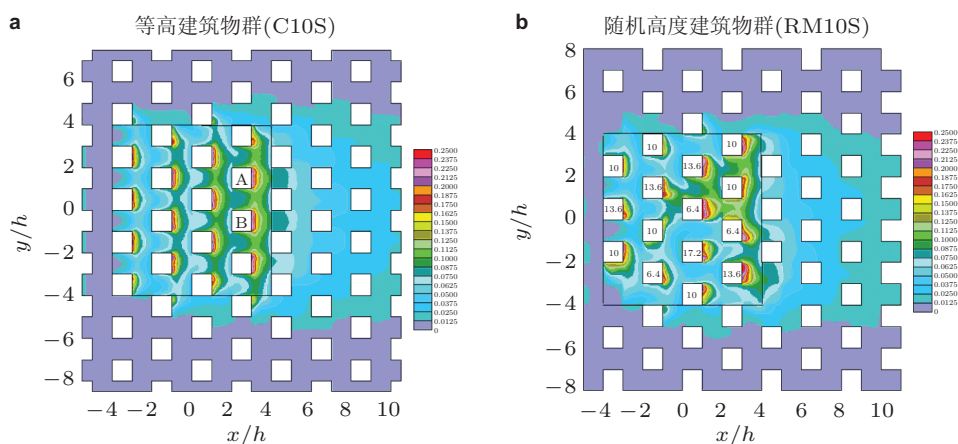


图 7

在 $z/h = 0.3$ 高度处的无量纲浓度分布 (由源浓度无量纲化). 方框表示地表面上的标量物源的位置. h 为建筑物平均高度. 左图 (C10S): 等高建筑物群, $h = 10$ mm; 右图 (RM10S): 随机高度建筑物群, $h = 10$ mm, 其中建筑模型上的数字为其高度 (mm)

图 7 比较了等高建筑物群 (C10S) 和随机高度建筑物群 (RM10S) 在 $z/h = 0.3$ 高度处的无量纲浓度分布. 图 7 也是计算域的底部平面视图. Xie 和 Castro (2006) 针对这种有尖角的建筑物群, 建议使用大约 $h/20$ 的网格分辨率模拟湍流运动. 然而, Boppa 等 (2010) 发现 $h/20$ 的分辨率对近面源区的标量物的模拟精度是不够的. 对于地表面源的污染物扩散, 精确模拟近面源区的细小尺度的湍流运动以及标量污染物扩散是非

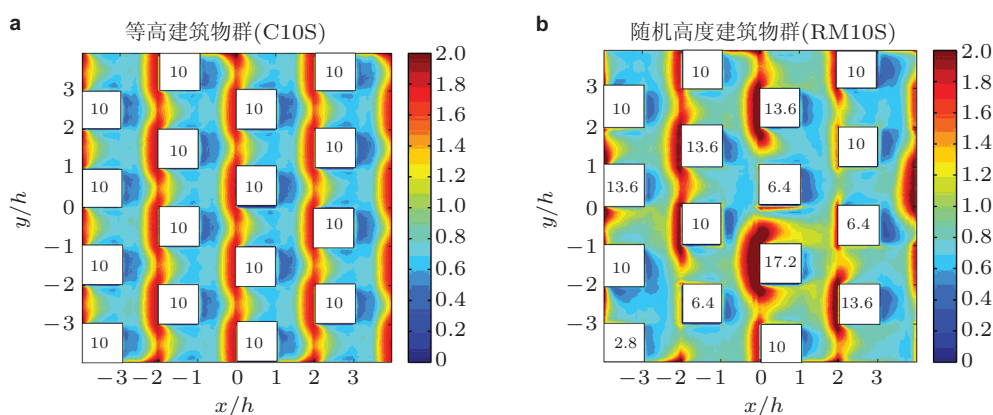


图 8

在 $z/h \approx 0.007$ 高度处和面源区域内 ($-4 \leq x/h, y/h \leq 4$) 垂直方向的污染物质通量. 其中建筑模型上的数字为其高度 (mm). 参见图 7

常关键的. 因此, Boppana 等 (2010) 使用了拉伸网格 (分辨率从固壁到计算域内部逐渐稀疏). 近壁网格尺寸大约为 $0.015h$.

图 7 显示了两情况的一定相似性, 但是随机高度建筑物群 (右图) 的无量纲浓度等值线相对更加不规则, 从而表明运输扩散过程在两个不同的表面上显著不同.

在 Pascheke 等 (2008) 的风洞实验中, 在面源区的外周测量到较高的污染物质量通量. 为了确认这点, 图 8 展示了在 $z/h \approx 0.007$ 高度处和面源区域内 ($-4 \leq x/h, y/h \leq 4$) 垂直方向的标量物无量纲质量通量的数值结果. 在这个高度, 因分子和 SGS 黏性导致的质量通量占主导地位 (相对湍流通量). 一个最重要的推论是, 两个表面的近壁质量通量分布非常不同. 在等高建筑物群 C10S 中, 在面源的侧向边缘的一些区域 (即 $y/h = -4, 4$) 的质量通量是大约两倍于其他区域, 例如面源的内部区域. 因此, 这些观察证实了实验的结果. 类似的现象在随机高度建筑物群 RM10S 中也观察到.

总之, 这些 LES 的数值实验清楚地表明了污染物或热扩散过程中, 建筑物群形状及其分布对于总体和局部的扩散系数有极其重要的影响. 优化建筑物布局, 可以提高城市环境内能源的利用效率, 提高城市建筑物冠层内的通风效应, 降低局地极端污染浓度等等.

3.3 模拟相对独立的高层建筑绕流

在 3.1 和 3.2 节的案例中, 最高层建筑的高度只是平均建筑物高度的 2 倍左右. 这更和欧洲的城市的情况相似. 在中国的众多城市中, 高层建筑的高度往往好几倍到十几倍于周围的建筑物高度. 在这种情况下, 周围的低矮建筑物可以简化为“粗糙度”而

无需区分其具体的几何形状. 这样我们可以把更多的计算资源使用到高层建筑及其周围的流场.

考虑城市大气边界层的高度为 1 km 左右, 夜间的高度要小一些. 数百米高的高层建筑几乎和大气边界层高度相同量级. 这样会产生很多有意思的现象. 比如烟囱效应, 地面污染物通过高层建筑排放到大气边界层以外; 高空的高速气流由于高层建筑的阻挡而形成一个流向面向地面的涡旋, 这当然有益于污染物的扩散, 但是可能对街道行人的舒适度产生影响. 高层建筑对大气边界层本身也会产生显著影响. 城市内大量的, 高密度的高层建筑群会极大地增加对大气边界层的空气动力学阻力, 降低风速, 增强温度层结效应, 加剧城市内污染. 所以高层建筑对污染物/热扩散影响是一个复杂的问题.

由于高空风速大, 对高层建筑物表面压力脉动峰值的预测也是一个大家关心的问题. 模拟高层建筑物的峰值风载是非常具有挑战性的. Daniels 等 (2013) 以这个应用背景为例子来展示 NEWTON 在这方面的功能. Daniels 等 (2013) 选择 CAARC (the Common wealth Advisory Aeronautical Council, Moss & Wardlaw 1970) 标准高层建筑作为测试案例. 使用最近开发的零散度的入口湍流产生方法 (Kim et al. 2013) 生成入口边界条件.

图 9 展示所计算的均方根压力脉动与风洞数据进行比较. LES 的结果总体上与风洞数据吻合得很好. 然而迎风面的压力脉动最大值的位置存在明显的不一致. 以前的文献中对这一点有过较大争论. 有的文献中认为不同风洞中较大范围不一致的湍流强度和风洞的实验误差, 是迎风面的压力脉动最大值位置不一致的原因. 有文献报告在方形柱体绕流的实验中, 在迎风面的中心实测到压力脉动最低值. 这提供了一定证据来支持现在的 LES 结果——即在迎风面的中心, 表面压力脉动值低于迎风面两侧的值.

另外, Daniels 等 (2013) 研究了入口湍流强度和湍流积分长度对高层建筑物表面压力脉动的影响. 图 9 显示, 入口湍流强度对表面压力的影响很大. Daniels 等 (2013) 选择了较为典型的城市环境的湍流积分长度——即几十米到百米的量级; 在这个范围内增加 (例如加倍) 或减半湍流积分长度, 影响很小 (参见图 9). 模拟更大湍流积分长度甚至天气尺度的风场 (需要更大的计算量) 已经列入我们的下一步工作计划. 图 10 显示了在同一时刻, 在 $2/3$ 和 $1/4$ CAARC 建筑物高度处典型瞬间的流场迹线和压力脉动等值线. 可见在这 2 个高度旋涡脱落有一个明显的相位延迟.

来流湍流和高层建筑自身产生脱落涡相互作用产生的尾迹, 对于城市内和城市下风处的污染物/热的扩散有很大的影响. 这一方面的研究应该深入下去.

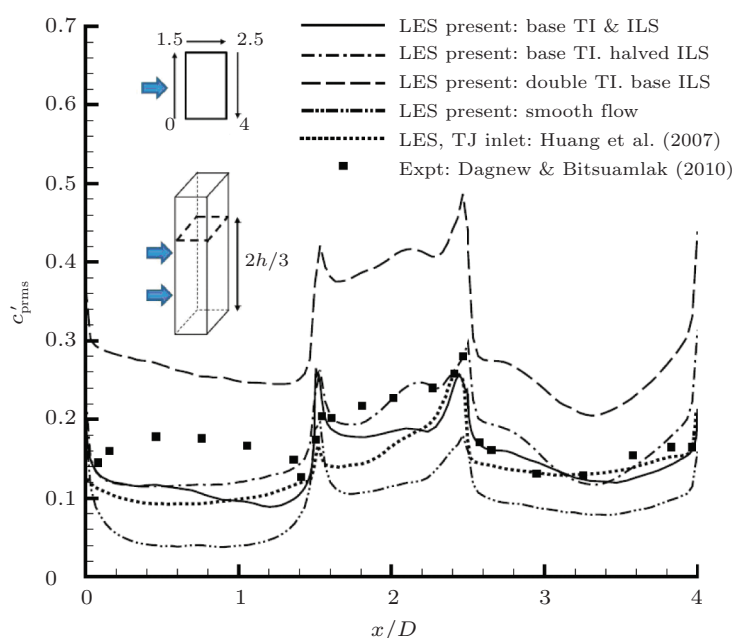


图 9

在 $2/3$ 高度处 ($y = 4D$, 其中 D 是 CAARC 建筑物在顺流方向上的宽度) 围绕 CAARC 高层建筑模型四周的均方根的压力脉动. TI: 入口湍流强度; ILS: 入口湍流积分长度

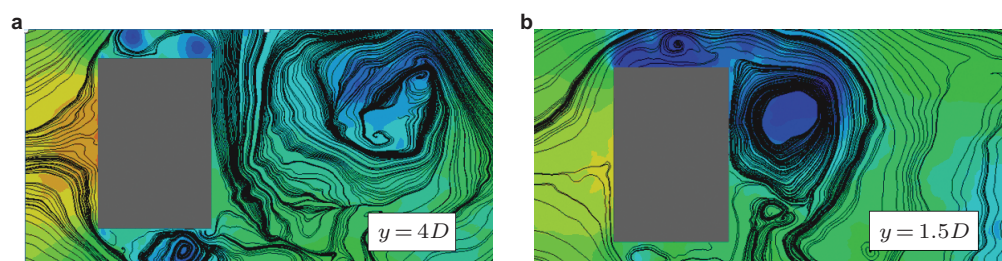


图 10

水平截面上典型的瞬时流场迹线和压力脉动等值线

4 天气尺度风变化的影响以及 LES 和中尺度程序的耦合计算

在 2.1.4 节简要地讨论了对于城市环境问题不同尺度风场 (从 10km 到 1m 量级) 的模拟计算. 在工程领域, 现在比较普遍的是对于城市邻里尺度 (1km 量级) 范围内风场的计算, 网格尺寸到 1m 左右以分辨在街道内对污染物/热扩散至关重要的携能湍流涡. 如果要求对城市空气质量进行准确预报以及提供改善建议, 特别是对于城市内雾霾生成的机理研究, 恐怕需要对整个城市范围内风场 (城市尺度, 10km 量级) 进行

高分辨率的计算. 现阶段的计算能力还不能够在城市所有的地方使用 1m 的网格. 那么使用嵌套网格/耦合方法是唯一的合理的选择. 嵌套网格可以分为单向嵌套和双向嵌套.

在单向嵌套的方式中, 嵌套网格域 (子计算域) 可以像一个通常的独立计算域一样运行, 但它的边界条件必须从上一级计算域 (母计算域) 得到, 子计算域的结果不反馈到母计算域. 如果在嵌套边界上子计算域和母计算域的网格尺寸的变化率不大, 子计算域的边界条件可以直接从母计算域结果内插值得到; 如果网格尺寸的变化率很大 (譬如大于 10), 我们提出在嵌套网格界面上内插值的基础上还需加入适当的零散度湍流脉动. 湍流脉动的生成使用我们发展的入口湍流生成方法 (Kim et al. 2013).

在双向嵌套的方式中, 有必要反馈子计算域的结果到母计算域. Sullivan 等 (1996) 和 Moeng 等 (2007) 在母计算域一个时间步长内, 让子计算域从母计算域获得边界条件, 推进计算直到母计算域的时间步长. 然后, 在母计算域的相应区域上流场被子计算域的平均流场取代覆盖. 这一步需要格外注意, 以避免任何数值不稳定.

城市环境和天气尺度 (中尺度) 的气象状况紧密相关, 这样的耦合计算同样可以采用上面的方法.

4.1 定常的风场条件下伦敦市中心 Marylebone Rd 和 Gloucester Pl 区域 (DAPPLE 试验场地) 的流场和污染物扩散

首先, 我们假定风场是定常的, 稳态的, 即风向和风速不变. 那么考虑风向对污染物的扩散有多大的影响. 另外, 我们假定在计算域的入口, 水平方向的风向和风速是不变的, 垂直方向的风速呈对数分布. 在入口的湍流统计数据从风洞试验获取; 采用我们近来发展的快速的入口湍流产生方法 (Xie & Castro 2008) 生成瞬变的湍流涡. 在其他边界采用通常使用的边界条件.

Xie 和 Castro (2009) 应用大涡模拟 (LES) 预报在倾斜风场 (即从 Marylebone Rd 由西向东方向顺时针旋转 -51° , 参见图 11 和图 12) 和垂直风场 (即 -90°) 中, 伦敦市中心 Marylebone Rd 和 Gloucester Pl 区域 (DAPPLE 试验场地: www.dapple.org.uk) 的流场和污染物扩散. 图 12 中用实线和虚线的箭头分别表示 -90° 和 -51° 的风向. 空间分辨率最高到 1m, 时间分辨率为 1s. 大涡模拟基于 1:200 风洞模型 (WTM, 参见平面俯视图图 12), 计算在这两种风场条件下的湍流和点源的污染物扩散. 图 11 还显示了全尺度的实地试验场地. 图 13 是在 -51° 的风场中的风洞模型.

图 12 显示了 DAPPLE 1:200 风洞模型平面图, 其中坐标原点在 Marylebone Rd-Gloucester Pl 交叉路口. x 轴大约是自西南向东北方向, 而 y 轴是自东南向西北方向.

图 14 是多面体网格的三维计算域. DAPPLE 1:200 风洞模型的建筑物平均高度

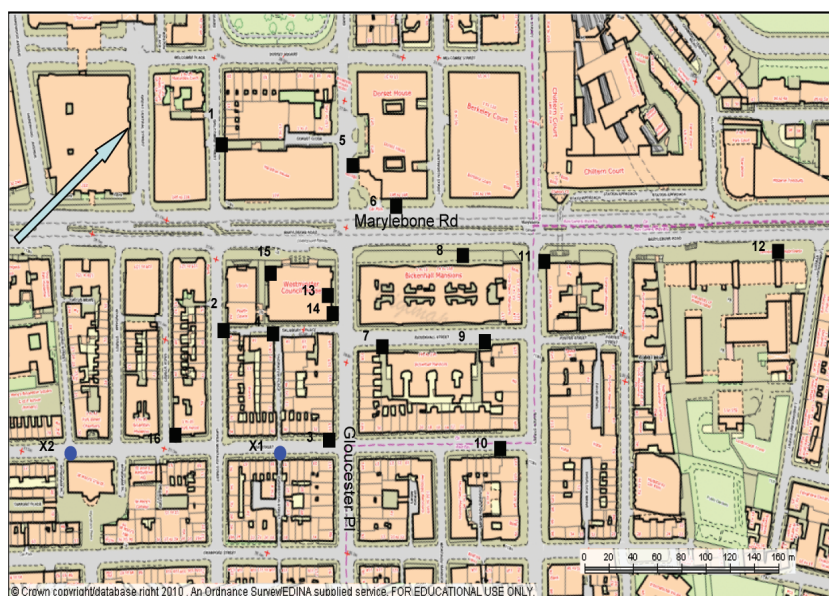


图 11

DAPPLE 实地试验现场: X1, X2, 点源位置; 方形符号, 采样站 (©Crown copyright/database right 2010)

$h = 110\text{mm}$. 建筑物平面占有率为 0.5. 大部分建筑基本上都是长方体形状, 但是高度各异. 道路布置主要以交错和并行交叉路口和 T 形路口为交替形式. 街道峡谷的模式也很显著, 且南北向街道比东西向街道更为明显. 建筑物附近的网格, 分辨率约为 $h/20$, 这相当于全尺度的 1m 分辨率. 图 14 中央部分为 DAPPLE 试验场. 因为没有 DAPPLE 试验场的上风区域内建筑物的具体几何数据, 在靠近入口边界处放置了 14 个高度为 DAPPLE 平均高度 h 的建筑物模型. Xie 和 Castro (2009) 发现这些人造建筑物的空间布置并不显著影响在 DAPPLE 试验场内的结果.

Xie 和 Castro (2009) 发现, 在城市冠层内空间和时间平均速度的方向发生改变. 对于 -51° 风, 平均速度方向变化不超过 10° . 而对于 -90° 风, 平均速度方向从冠层以上的 -90° 沿顺时针方向转动至冠层内的 -50° . 为进一步解释这种现象, 图 15 展示了在 -90° 风中 Marylebone Rd 上不同的高度处 (即 $z/h = 0.1, 0.5$ 和 1) 平均的速度矢量 (U_m, V_m) 的变化. 图 15(a) 和 图 15(b) 呈现明显的顺 Marylebone Rd 由西向东的流动, 而不是由东向西. 这可能是由于局部的建筑物排列造成的, 即 Marylebone Rd 上 3 个略微错开的建筑物 (图 15(a) 标记为 “staggered”). 例如, 在 Marylebone Rd 与 Gloucester Pl 交叉路口东侧, 路突然增宽, 导致气流从 Gloucester Pl 转向由西向东. 此外, 在其他的 2 个交叉路口有同样的现象. 这些综合作用迫使街道内空气由西向东流,

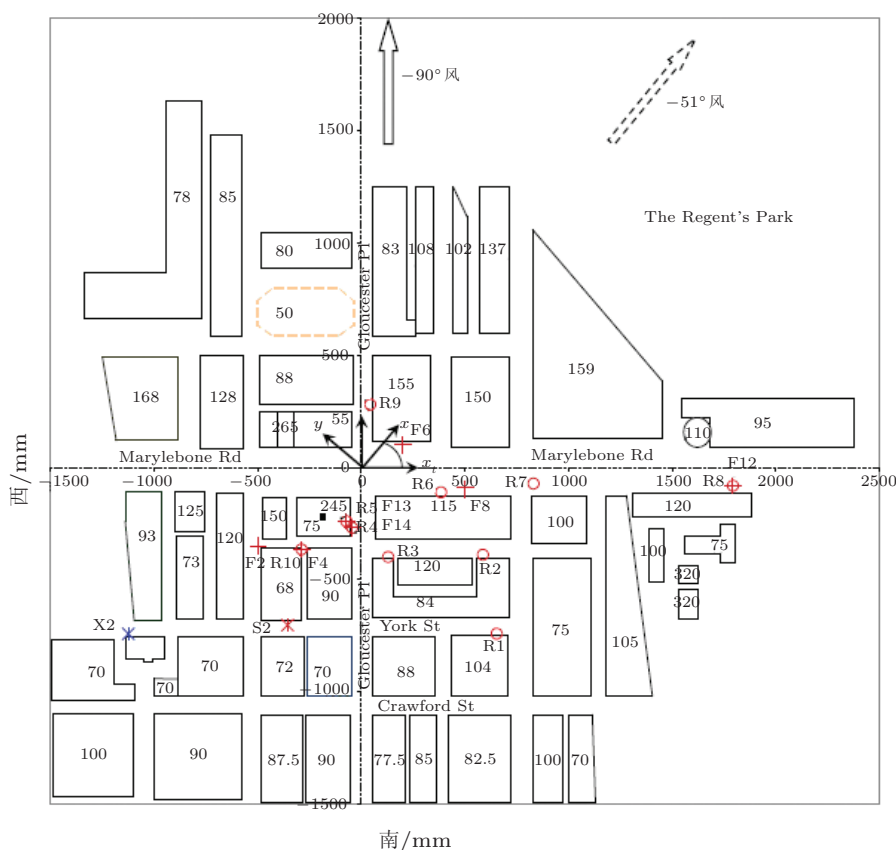


图 12

DAPPLE 1 : 200 风洞模型平面图. 在每个建筑物模型上的数字表示其高度 (mm). 模型坐标单位为 mm: 其中 x_t (风洞坐标) 自西向东, y_t 自南向北, z 从地面到风洞顶部. x, y, z 是计算模型中的坐标 (-51° 风, 参照图 14). S2 和 X2, 分别为风洞模型和实测现场中的点源位置. R1~R10 为在定常风中的采样站点 (4.1 节), F2~F14 为在实际非定常风中的采样站点 (4.2, 5.2 节)

即 -50° 方向. 这些结果表明, 对建筑物几何形状进行分辨的计算是追求高分辨率城市环境数值模拟的唯一出路.

Xie 和 Castro (2009) 研究了建筑物的几何造型对总体的和局部的流动性态和污染物扩散的影响. 图 16 显示在 -51° 风中点源扩散的瞬时浓度等值线 (行人的高度处). 研究发现, 空间平均的湍流脉动值的方差峰值既不出现在建筑物平均高度处也不出现在最大高度处, 而是出现在大型高大的建筑物高度处. 研究同时还发现, 近源场的浓度平均值和脉动值高度依赖源的位置和局部的建筑物几何造型.

大涡模拟 (LES) 结果总体上和风洞数据吻合良好. 大涡模拟 (LES) 的结果表明,



图 13

安装在风洞的高分辨率 DAPPLE 模型 (1 : 200). 在风洞实验的基本简单模型和 LES 计算模型中, 模型中高分辨率的中央部分被替换为块状的建筑物 (类似于出现在照片中的其他建筑物)

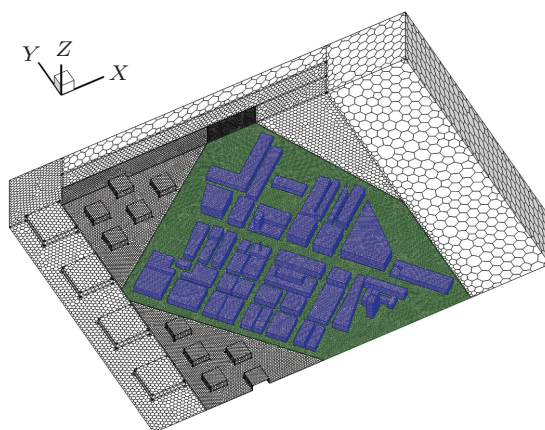


图 14

多面体网格计算域. 计算域的大小: $L_x = 6\text{ m}$, $L_y = 4\text{ m}$, $L_z = 1\text{ m}$ (1 : 200 风洞模型尺度) 中央部分 (蓝色和绿色区域) 为 DAPPLE 试验场. 在 DAPPLE 试验场的上风区域, 放置了 14 个高度为 DAPPLE 平均高度 h 的建筑物模型

1 m 的分辨率能够提供在定常风场和中性的热层结条件下对流场和污染物浓度场的合理估计. 城市冠层内污染物扩散传输对风场的方向非常敏感. 譬如相对 -90° 方向风向改变 $\pm 1^\circ$, 某些街道内的风向可能有 180° 的变化.

4.2 实际风场下的污染物传输扩散

笔者曾经使用英国气象局 (Met Office) 的 UM 程序产生的日常天气预报数据作为

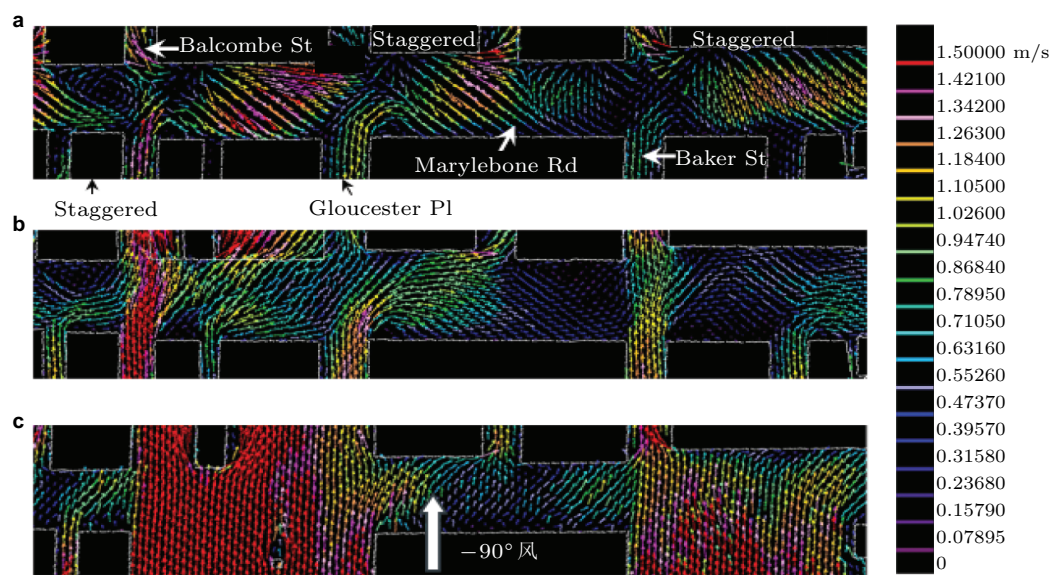


图 15

在 -90° 风中, Marylebone Rd 不同的高度处时间平均速度矢量. (a) $z = 2\text{ m}$; (b) $z = 11\text{ m}$; (c) $z = 22\text{ m}$ (全尺度. 注意建筑物平均高度为 22 m)

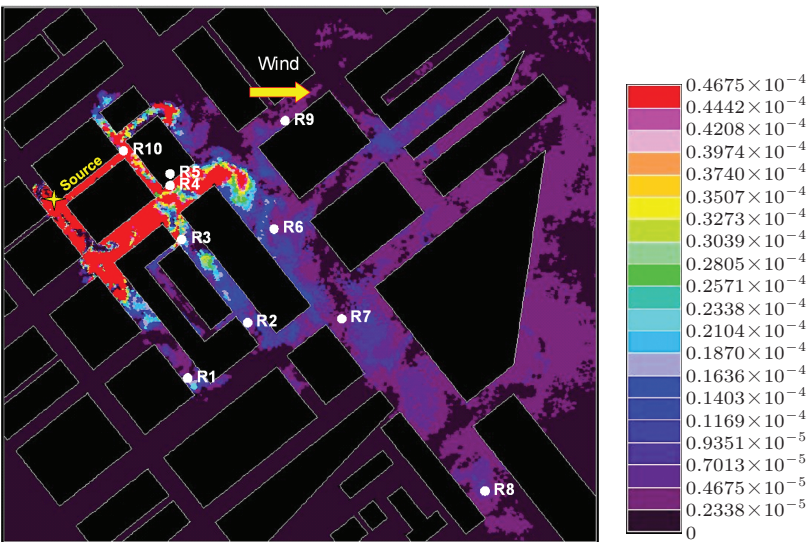


图 16

在 DAPPLE 试验场区域的点源污染物扩散浓度等值线的鸟瞰图. 颜色代表在行人高度处的污染物浓度

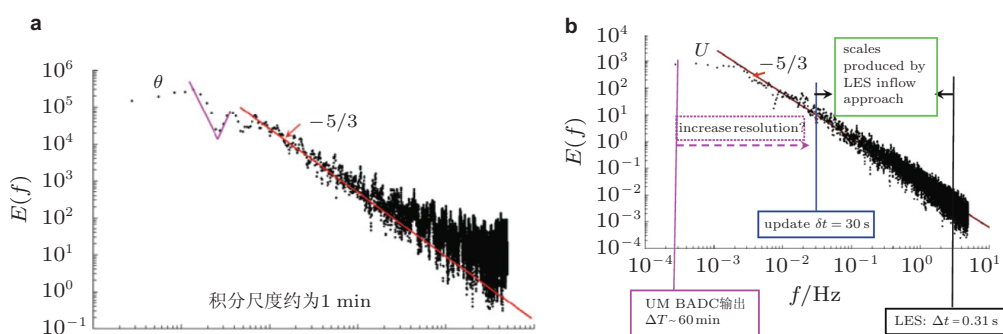


图 17

在伦敦 BT 塔顶部实测 10 Hz 风场的时间序列能谱. (a) 风向 θ (参见图 18); (b) 水平方向风速幅度 U . UM: 英国气象局 (Met Office) 的 Unified Model (UM); BADC: 英国大气数据中心; 这个是基于 2007 年以前的数据, 但是最新的时间分辨率没有显著改善

边界条件来驱动城市环境的大涡模拟计算 (即单向、离线耦合). 这些数据水平方向的网格尺寸是公里量级的, 时间步长是分钟量级的. 大涡模拟需要边界条件提供足够的大尺度变化数据, 比如在时间尺度上大于 1 min 的所有流体运动. 小于 1 min 时间尺度 (湍流积分尺度) 的流体运动由笔者发展的入口湍流生成方法产生. 然而, UM 数据的实际最小时间尺度还是远大于湍流积分尺度. 参见图 17. 这样在二者之间直接存在一个灰色区域, 影响大涡模拟的准确计算.

为了测试大尺度变化风场和城市环境的大涡模拟的单向耦合计算方法, Xie (2011) 利用现场实测的风场数据作为边界条件对 DAPPLE 试验场的湍流运动和污染物扩散进行计算. 10 Hz 分辨率的风场数据是在高度为 190 m 的伦敦 BT 电信塔上采集的 (Wood 2010). BT 电信塔在 DAPPLE 试验场大约 1500 m 以东. Xie (2011) 提取了 2004 年 6 月 3 日 16:00—17:00 的实测风场数据 (参见图 17 和图 18). 这些数据被处理为 60 s 和 30 s 平均的数据——假定大于 60 s 或 30 s 的湍流涡对总湍流强度的贡献很小. 60 s 和 30 s 平均的数据的一致性也支持了这点. 平均后的数据用来生成入口边界条件来驱动大涡模拟 (LES) 的计算. 具体在一个平均时间步长 60 s 或 30 s 内, 入口边界条件的处理和 4.1 节相同. 在 16:00 开始初始化大涡模拟的湍流计算, 在 16:30 释放在 X2 处点源, 16:45 关闭. 数据取样和平均开始于 16:30, 止于 17:00. 图 18 显示, 在此期间的风速幅值变化 $\pm 36\%$, 风向变化 $\pm 22^\circ$. 但是在 16:30 至 17:00 期间, 风的方向相当稳定, 几乎稳定在西南风的方向.

图 19 给出了在不同的风场条件下在 14 号站点 (参照图 11) 的 3 min 平均的污染物浓度随时间的变化. 两工况 “LES run1, BT tower data” 和 “LES run2, BT tower data” 只是采用了不同的初始条件. 这两种工况下的结果和实测量都较好, 因此表明 3 min 平

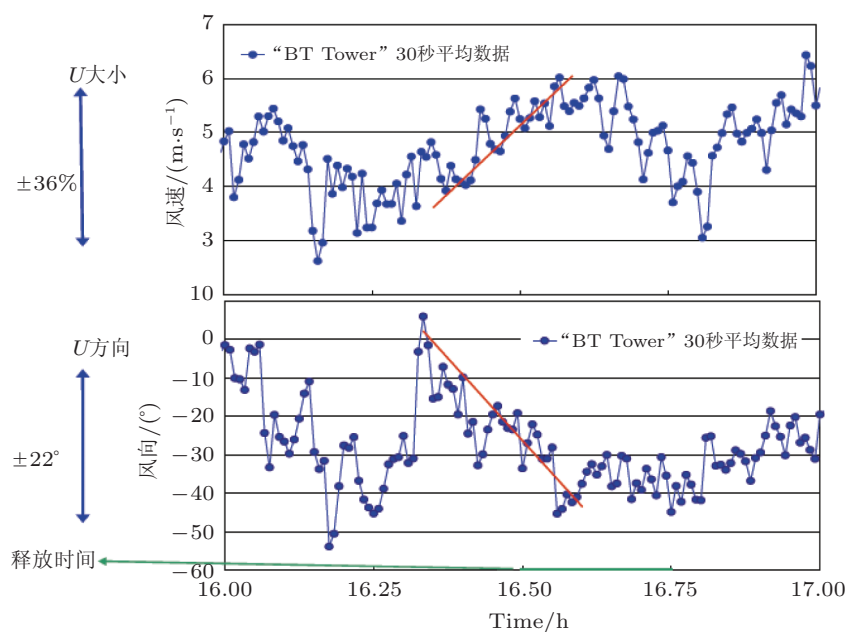


图 18

在伦敦 BT 电信塔顶部实测的 30 s 平均的水平方向风速幅值 U 和方向 θ (沿 Marylebone Rd 方向——即图 13 中的 x_t 轴顺时针方向). 横坐标上的绿色标示为 15 min 的点源释放时间

均的标量浓度对初始条件不敏感. 在定常风场条件下工况“LES, mean wind”的风速幅值和方向分别等值于 BT 电信塔数据 16:30—17:00 的平均风速 $\langle U \rangle$ 和平均方向 $\langle \theta \rangle$. 在定常风场条件下的其他 3 个工况“LES, mean wind +6°”, “LES, mean wind +12°”和“LES, mean wind -6°”的风速幅值都是 $\langle U \rangle$, 风方向分别为 $\langle \theta \rangle + 6^\circ$, $\langle \theta \rangle + 12^\circ$ 和 $\langle \theta \rangle - 6^\circ$. 这些数值实验被用来检测标量扩散对风向的敏感性. 不出意料地, 图 19 显示了在定常风场条件下 3 min 平均的标量浓度对风向很敏感. 图 19 还显示, 在定常风场条件下所计算的 3 min 平均的标量物浓度峰值, 可以比在非定常风场条件下计算的数值和现场实测的数值大到一个数量级. 可能有人会说, 仅仅针对一个站点的 3 min 平均的标量浓度结果得到如此结论, 可能是欠谨慎的. 然而, Xie (2011) 也同时比较了其他站点的数据, 这些数据都一致证实了这个结论. 因此可以得出结论, 在定常风场条件下, 在烟羽的核心区域大涡模拟过高地预报了标量浓度值, 而在实际风场条件下则显著地改善了预报结果.

在其他条件一致的情况下, 在实际大尺度变化的风场中预测的污染物浓度值和 在定常稳态风场中的预测值相差达到一个数量级. 这确认了耦合计算的重要性.

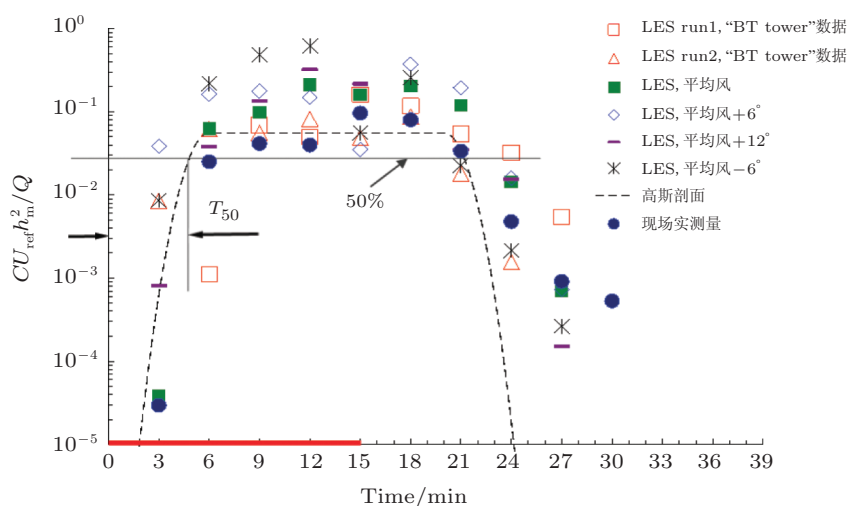


图 19

在不同的风场条件下在 14 号站点 (参照图 11) 的 3 min 平均的污染物浓度随时间的变化. 横坐标是全尺度时间. U_{ref} , 自由流速度; Q , 源头浓度通量; h_m , 平均建筑高度; T_{50} , 污染物输运时间. 红色实线: 点源释放时间; 虚线: 组合形式的高斯分布的烟羽大致位置和宽度; 黑色细实线: 高斯分布的最大值幅值的 50%. 实心圆: 现场实测量; 空心方块和空心三角形, 利用 BT 塔数据作为入口边界条件但是使用不同的初始条件; 实心方块, 菱形, 短划线条, 星号, 定常的速度大小和方向 (但提供入口湍流生成) 分别为 $\langle U \rangle$ 和 $\langle \theta \rangle$, $\langle \theta \rangle + 6^\circ$, $\langle \theta \rangle + 12^\circ$ 和 $\langle \theta \rangle - 6^\circ$, 其中 $\langle U \rangle$ 和 $\langle \theta \rangle$ 分别为 BT 电信塔数据 16:30~17:00 的平均风速和方向

5 温度稳定层结的影响

大家知道温度稳定层结 (譬如强逆温层) 对极端污染物浓度的形成和雾霾的形成有重要的影响. 但是, 对于这些影响的定量分析非常困难. 物理风洞只能模拟较弱的温度层结. 现场试验很难控制和重复. 可靠的数值模拟结果也很少见诸于文献. 笔者近年对局地热层结效应和入口流场的热层结效应 (总体热层结效应) 的定量分析进行了尝试. 5.1 节和 5.2 节对此分别作了简要回顾.

5.1 局地热层结效应对城市环境的影响

Boppana 等 (2014) 采用了大涡模拟研究局地表面加热和冷却对建筑物群流场的影响. 图 20 显示了一个理想化的建筑物群的一个重复单元. 水平方向采用周期性边界条件. 通过调节从地面输入或传出的热通量得到不同程度的局部热层结情况 (不同的 Richardson 数 Ri_τ : 基于建筑物高度、平均摩擦速度和总体平均温度和地面温度之差). 在局部层结稳定、中性和不稳定情况下的阻力系数 C_d (即平均摩擦速度和建筑

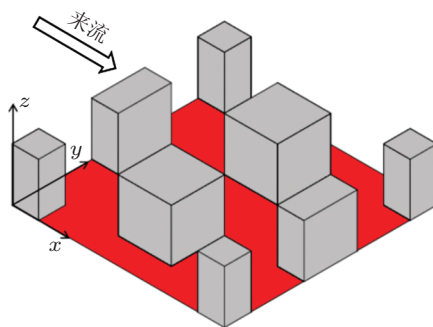


图 20

在计算模型的三维视图. 在立方体型建筑物模型之间的底表面上进行加热或冷却

物高度处空间和时间平均速度比值的平方)、传热系数 C_h (基于建筑物高度处空间和时间平均速度, 地面热通量和总体平均温度和地面温度之差)、湍流的结构和湍流积分长度进行了细致的比较. 随着 Ri_τ 的增高, 等效于热层结特性从本地热不稳定性到稳定性的变化, 空气动力阻力系数 C_d 和表面传热系数 C_h 逐渐下降. 不同的热边界条件 (例如恒定的热通量或恒温) 和计算域大小对这个现象的总体效果影响很小. 在所考虑的 Ri_τ 幅值范围内, 各向异性不变量的图表显示, 湍流结构在中性和不稳定层结的情况下几乎是相同的, 但和在稳定层结的情况比较略有不同. 相比于中性层结的情况, 在稳定层结下顺流方向的湍流的积分长变小, 在不稳定层结下垂直方向的湍流的积分长度加大. 象限分析表明, 增加地面加热 ($|Ri_\tau|$ 升值) 相应地增加了建筑物冠层上面的湍流喷发 (ejection) 强度. 进一步的分析显示, 在局地不稳定和稳定层结的条件下, 在建筑物冠层上面动量和热量传输机制非常相似.

图 21 显示在 $-13 < Ri_\tau < -0.2$ 范围内, 增加地面热通量, 空气动力阻力系数 C_d 和传热系数 C_h 单调增加. 在 $0 < Ri_\tau < 9$ 范围内, 增加地面表面冷却, C_d 和 C_h 单调减小. C_d 和 C_h 随 Ri_τ 的减小而稳步单调增加是由于浮力作用而产生的湍流动能增加. 这些结果表明, 即使在较弱非中性的范围内, 城市环境内热层结效应的影响也是不可忽略的.

敏感性数值实验表明, 空气动力阻力系数 C_d 对网格分辨率相对不敏感. 但是如果网格分辨率不够高的话, 传热系数 C_h 对近壁区域的网格分辨率非常敏感. 因此, 传热系数 C_h 对计算量提出了较高的要求, 这和 3.2 节的结论是一致的.

5.2 入口流场的热层结对污染物在城市建筑物群中的扩散的影响

这里给出一个尝试对总体热层结效应作定量分析的例子. Xie 等 (2013) 研究了上风来流中的热层结效应对城市环境中污染物扩散的影响. 这种情况类似于一个充

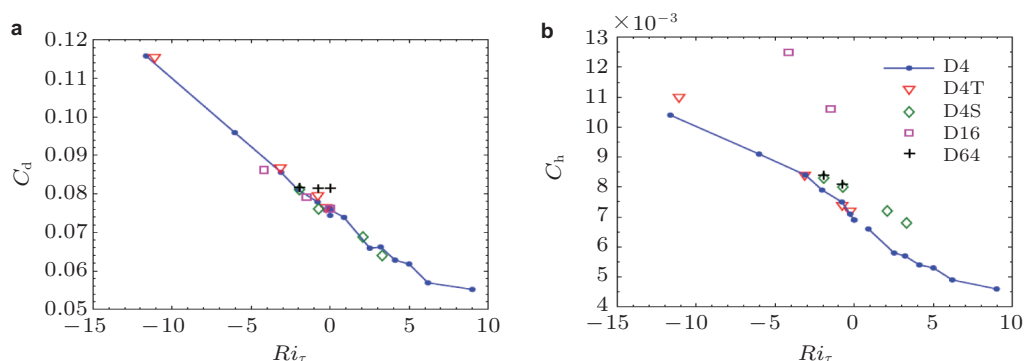


图 21

空气动力阻力系数 C_d 和传热系数 C_h 随 Richardson 数 Ri_τ 的变化 (Boppana et al. 2014). 图中不同的符号表示不同的网格分辨率

分发展的非中性层结流场 (例如, 流经一个较大城市尺度的区域) 进入一个邻里尺度 (neighbourhood-scale, 约 1 km^2) 的城区. 在相对较小的邻里尺度里, 局地的传热效果就不大重要了. 因此在大涡模拟中, 地面和建筑物表面可以设为绝热边界条件.

这里建筑物群模型和 4.1 节的伦敦市中心 Marylebone Rd 和 Gloucester Pl 区域 (即 DAPPLE 试验场地) 模型相同. 研究进行了一系列的数值实验, 但是仅考虑较弱非中性层结条件, 即总体 Richardson 数的绝对值 $|R_b| \leq 0.2$ (即基于建筑物高度, 自由来流速度和平均空气温度和地面温度的差值). 图 22 显示在 -51° 风场中 DAPPLE 试验场地垂直剖面上 (即 x - z 面, $y = 0$, 参看 图 13) 瞬时温度等值线 (K).

基于对 DAPPLE 试验现场数据 R_b 数的估计 (即 $-0.17 \leq R_b \leq -0.05$), Xie 等 (2013) 进行了一系列数值试验. 其中测试的总体 Richardson 数的范围为 $-0.2 \leq R_b \leq 0.2$. 图 23 给出了部分结果. Xie 等 (2013) 发现, (1) 即使在弱热层结的条件下, 在某些站点 (即在烟羽的中心区域) 的平均浓度的幅值和在中性条件相比相差达一个数量级. 不管在定常风场还是在不定常风场中, 这个结论是一致的. (2) 相对于在中性层结条件下, 在不稳定的条件下的大涡模拟大幅度提高浓度预测的精度 (即相对于现场实测值). 在 $R_b = -0.1$ 的条件下模拟的平均浓度和 DAPPLE 试验场地实测数据的吻合最好. 这再次表明, 在城市环境中即使较弱不稳定层结对污染物扩散的影响也是极其重要的.

6 极端条件下的极端污染物浓度

往往是极端条件下 (例如特殊的天气条件) 的极端污染物浓度, 而不是通常条件下的平均污染物浓度, 导致城市环境中的严重的防灾问题 and 环境问题. Xie 等 (2007) 采

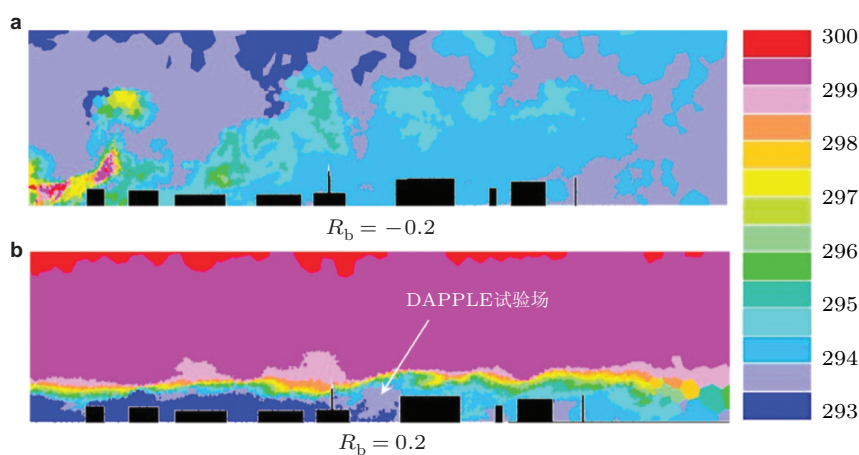


图 22

DAPPLE 试验场地. 在 -51° 风场中垂直剖面 (即 x - z 面, $y = 0$, 参看 图 13) 瞬时温度等值线 (K) (Xie et al. 2013). 风向是由左向右

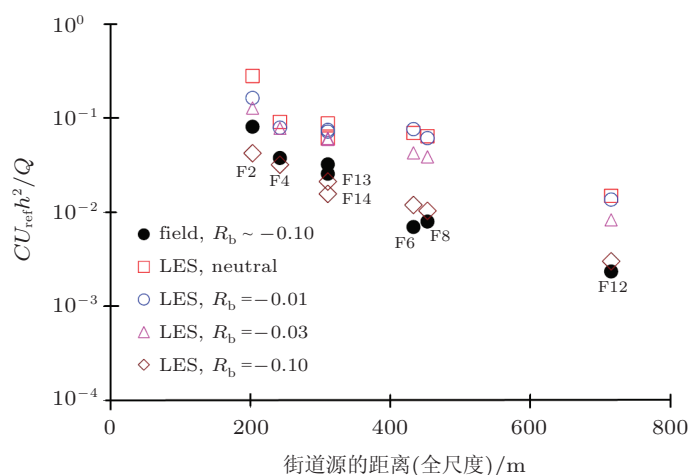


图 23

在站点 F2, F4, F6, F8, F12, F13 和 F14 (参看 图 13) 30 min 平均的标量物浓度. U_{ref} , 自由流速度; Q , 点源处标量浓度通量. h , 平均建筑高度. 街道距离 (street distance) 定义为 $S = |x_F - x_S| + |y_F - y_S|$, 其中 (x_F, y_F) 和 (x_S, y_S) 分别为采样站点和点源的坐标

用大涡模拟和风洞试验研究粗糙壁面上湍流边界层中点源扩散的被动标量物的浓度脉动. 点源包括一个高架源和一个地面源. 大涡模拟对浓度脉动的统计数据包括二阶矩进行了预测, 并且用风洞试验数据进行验证 (参见 图 24). 此外, 使用量纲分析的方法, 估计了浓度相对脉动 (即浓度脉动的均方根值和当地的时间平均浓度的比值) 在

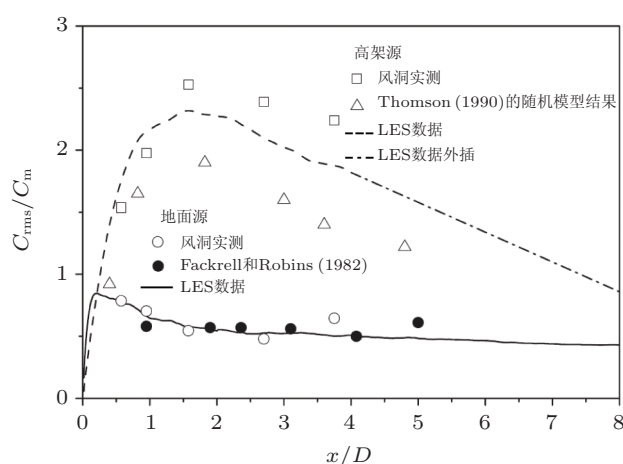


图 24

标量浓度的相对脉动值 (浓度脉动的均方根值和当地时间平均浓度的比值 C_{rms}/C_m)

地面源下游远场的变化趋势.

不管是大涡模拟还是风洞试验都只能预报非常有限的一段时间序列的浓度值, 自然不能直接预报某地可能出现的最高/极端浓度值. Xie 等 (2007) 使用极值理论 (Extreme Value Theory, EVT) 的技术来预测可能出现的极端浓度. 他们使用 Generalised Pareto Distribution (GPD) 函数来模拟浓度时间序列的概率密度函数在高段尾部的分布, 从而预测可能出现的极端浓度. 他们使用这种方法对大涡模拟和实验数据都进行了大量的分析. 研究发现, 预测的可能最大浓度 (I_0) 对当地平均浓度 (C_m) 的比值 (相对最高浓度) 可以高达 50 (参见 图 25). 也就是说, 基于平均浓度值的安全评估过于乐观.

Xie 等 (2007) 指出, 相对最高浓度随下游距离的变化趋势和标量浓度的相对脉动值的变化趋势相似. 在高架源的情况下, 二者在远场都衰减接近零. 但这种趋势是否会持续下去, 目前还不清楚. 在地面源的情况下, 相对脉动值在远场趋近一个较明确的非零极限; 而相对最高浓度的渐进行为还是不太明显, 其中在远场有些迹象显示衰减逐渐缓慢. 这里自然就有一个问题, 相对最高浓度和浓度的相对脉动值 (或更高阶矩) 是否有相似性或简单的联系? 如果是这样, 对相对最高浓度的预报就方便容易多了.

7 城市冠层内的化学过程和湍流的耦合

微颗粒 (PM) 研究的焦点最近已转移到超微颗粒 (UFP) 或纳米颗粒物. 最近的毒理学研究已证明 UFP 或纳米颗粒对人类的健康有不利影响 (Donaldson et al. 2005,

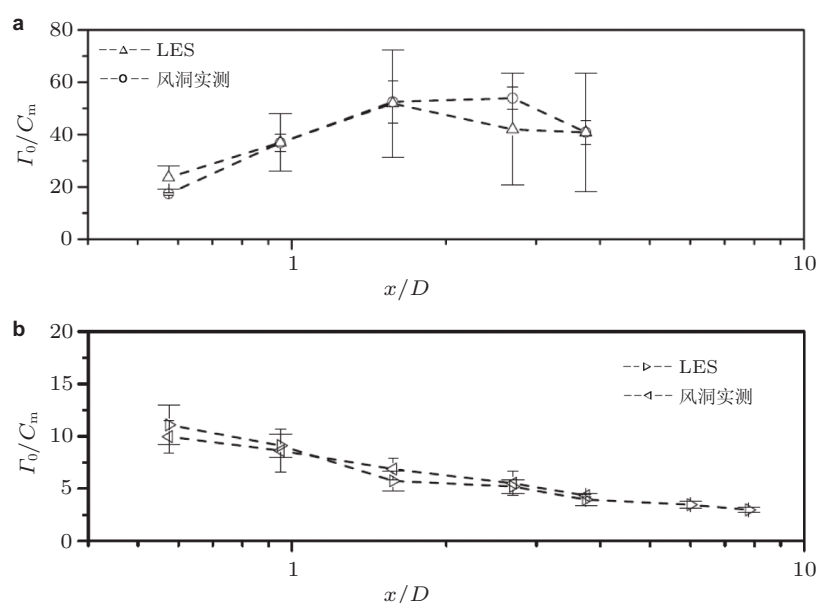


图 25

相对最高浓度 (即可能最大浓度 Γ_0 相对当地平均浓度 C_m 的比值). (a) 高架源, (b) 地面源. 竖线和横线帽盖: 95% 信心范围; 长横线帽盖, LES; 短横线帽盖, 风洞数据

Oberdorster & Utell 2002), 并且这已得到流行病学研究的支持——和心血管健康有的显著相关 (Atkinson et al. 2010). 需要强调的是, 在市区大气中的大部分纳米颗粒是源于道路交通排放的半挥发性有机化合物 (SVOCs).

研究化学过程和湍流耦合的一个重要原因是, NO_2 和 UFP 的生产/消耗的相关物理与化学过程是快速的 (分钟量级). 这些高度非线性过程的时间尺度和城市冠层 (UCL) 中的湍流尺度大约相同. 因此, 耦合研究对于发展一个先进的三维数值模型至关重要. 该模型能够揭示这些高度非线性过程, 并预测这些污染物在 UCL 中的发展. 这种模型的结果对于发展高度参数化的预报模式的也是非常有价值的, 其实例是 OSPM (Berkowicz 2000) 和 ADMS-Urban (McHugh et al. 1997).

另一个重要问题是如何在一个区域尺度城市空气质量模型 (覆盖了街道网络) 里描述 UCL 里的亚格子 (SGS) 的浓度, 和/或插值/预估 UCL 模型中的网格平均的污染物浓度. 实际上, 污染物浓度可能从一条街道变化到另外一条街道, 并有高度的 (在时间和空间上) 亚格子 (SGS) 各向异性. 由于响应于局地排放而出现的 UCL 内高度非线性的物理和化学过程, 加权平均的方法是不成功的. 例如, Zhong 等 (2014) 发现, 在典型的城市地区 “平均” 的模式可能显著低估了实际的臭氧浓度. 另一方面来说, “平均” 模式对于更 “绿色” 和/或更少交通的区域预报表现得会好一些.

7.1 气相化学过程和湍流的耦合

7.1.1 耦合的一般性问题

有些问题涉及到城市街道峡谷模型中化学过程与湍流的耦合. 首先, 耦合可以在一个 RANS 模型实现 (Kim et al. 2012), 或在一个 LES 模型实现 (Bright et al. 2013). RANS 模型计算的流场通常是定常和光滑的, 而 LES 模型计算的流场是不定常和粗糙的; 浓度场也是如此. 因此, 对于 LES 满足数值稳定性的要求, 这是更有挑战性的. 其次, 由于高昂的计算成本, 应选择一个适当复杂程度的化学方案. 这种方案需要涵盖和 NO_2 生产/消耗相关的主要的反应过程. 第三, 反应速率应仔细评估以避免不必要的计算, 譬如计算非常慢的反应速率, 和使用极其小的时间步长 (例如, 一个“刚性”的化学方案) 来计算非常高的反应速率. 第四, 对非线性化学系统还没有公认的标度化规则, 这类的化学模式算出的污染物浓度受到几个因素制约: 各种排放物的排放速率 (在一般情况下, NO_x 和 VOCs), 每种污染物在街道冠层高度处的背景浓度, 以及入口/出口边界条件. 由于标度化问题, 还没有这样的实验室工作 (例如在城市街道峡谷中光化学过程以及湍流混合) 可以用来检验数值模型. 因此, 对于数值模拟结果的评估很大程度上依赖于现场数据. 不幸的是, 现场数据是十分稀缺的.

7.1.2 在 LES 中 NO_x - O_3 的化学耦合

Baker 等 (2004) 是第一个研究 LES 中 NO_x - O_3 的化学耦合应用与街道峡谷环境的报告. 这项研究后有其他几个数值研究跟进 (Baik et al. 2007, Grawe et al. 2007, Kikumoto & Ooka 2012). 尽管在这个系统中大气化学过程被高度简单化了, 但它成功模拟了关键的臭氧和 NO_x 滴定效应. 此外, 模型的关于 NO_x ($\text{NO} + \text{NO}_2$) 和 O_x ($= \text{O}_3 + \text{NO}_2$) 的守恒特性使其成为一个很好的化学过程与湍流耦合的基准测试案例. Baker 等 (2004) 使用了经典的街道峡谷的 LES 设置: (1) 一个理想化的街道峡谷, 其中高宽比 (AR) 为 1, (2) 风向在峡谷上方垂直于街道轴线, (3) 在屋顶水平上方对所有速度分量采用周期边界条件. 下面的化学反应都内置在 LES 模型中



此化学系统 (1)~(3) 具有一两分钟的时间尺度; 即从一组初始浓度开始, 系统会在一两分钟左右接近化学平衡. 应该注意的是, 此 LES 产生的街道峡谷内主体涡的翻转时间是几分钟, 这和 (1)~(3) 化学系统中的时间尺度的量级相同. 因此, 耦合对于计算化学物的浓度分布是至关重要的. 考虑到主要的大气化学过程是高度非线性的, 街道峡

谷的湍流混合和主要化学反应的时间尺度是相近的, 因此必须研究动力学和化学过程结合的共同作用, 以量化这些影响.

Baker 等 (2004) 选择了几个典型工况, 涵盖了面源与线源问题, 在街道峡谷上方关于化学物质的周期与非周期边界条件问题, 以及低与高排放的问题. 结果显示了所有化学物浓度 (包括一个被动标量) 的显著空间变化. 被动标量空间分布的一个重要应用是针对于 PM_{10} 和 $\text{PM}_{2.5}$, 其凝结和冷凝/蒸发过程在 UCL 中被假定为可忽略不计 (“惰性”). Baker 等 (2004) 采用了偏离光稳定化状态来评估在街道峡谷中给定位置的化学平衡的水平

$$\delta_{\text{ps}}(\%) = (k[\text{NO}][\text{O}_3]/J_{\text{NO}_2}[\text{NO}_2] - 1) \times 100 \quad (4)$$

零值表示化学平衡, 否则它表示偏离化学平衡的程度. 他们的结果显示, 在排放源附近和在街道峡谷上方和背景空气交界处, 显著偏离化学平衡 (表示 “年轻”, 新鲜混合的气团), 而在主要的旋涡中心附近, 空气接近化学平衡 (表示 “高龄” 的充分混合的气团).

7.1.3 LES 耦合简化的化学方案

由于 NO_x , O_3 和 VOCs (挥发性有机化合物) 之间的反应 (无论是从交通或其它源排放的), 在 UCL 内的光化学过程是十分复杂的. Bright 等 (2013) 结合了 LES 动力学和新开发并且计算经济的化学过程机制 (称为简化的化学方案, RCS). 该 RCS 本身是基于由 Jenkin 等 (1997) 开发出的一种近似显式的涵盖 “所有” 反应的化学机制 (the Master Chemical Mechanism, MCM). 在条件设置和时间尺度和街道峡谷相关的情况下, RCS 得到了和 MCM (相应的也得到了现场和室内观察验证) 的比较验证. 该 RCS 包括 51 种化学物和 136 种化学反应, 其中有甲烷和 8 种亲代非甲烷碳氢化合物 (NMHCs) 包括 (异戊二烯, 乙烯, 丙烯, 甲醛, 乙醛, 甲醇, 乙醇和硝酸过氧化乙酰). 特别是 RCS 考虑了短期寿命的羟基 (例如 OH), 促成 VOC 在 NO_x 存在的环境下的降解中生成 O_3 . 在 LES 模型中装入快速化学过程具有挑战性, 需要仔细的测试. 对于 RCS 里中期和长期寿命的化学物质, 例如, NO, NO_2 , O_3 和 CO, Bright 等 (2013) 在数值积分中使用了 0.01 s 时间步长. 而对于短期寿命的化学物质, 如 OH, HO_2 和 RO_2 , 采用 0.001 s 时间步长, 这意味着更多的计算.

Bright 等 (2013) 报告了以下主要结论: 在 LES 动力学框架内, 该系统对于 RCS 里增加的化学过程 (与 O_3 - NO_x 方案相比) 较盒子模型更不敏感. 这表明, 一个盒子模型固有的快速和完全混合会导致对 NO, NO_2 和 OH 的浓度的高估以及对臭氧浓度的低估; 而在一个真正的街道峡谷流中 (由 LES 模拟), 缓慢和不完全的混合分离了各种空气云团和延缓了化学反应. 分离的效果也影响 HO_x 的浓度水平, 与更准确的 LES 方

法相比, 盒子模型中超高浓度的 OH 显示, 在峡谷内由 OH 驱动的反应排放过程的程度被高估了. 在这项研究中, VOC 的氧化化学过程已经被量化了. 从 O_3 - NO_x 到 RCS 机制, NO_2 和 O_3 的水平较高而 NO 较低, 反映了在更细致的化学过程中额外的 NO 转换成 NO_2 (和净臭氧的产生). 对于中度污染排放工况, 在街道峡谷内的化学过程导致了 30% 的 O_x (O_3+NO_2) 增加 (相对于排放源内包含的 NO_2 成分).

7.2 气溶胶动力过程和湍流的耦合

虽然未得普及, 气溶胶传输还需要和计算流体力学耦合考虑. 基本上, 拉氏 (Lagrangian) 或欧拉 (Eulerian) 模型都可以运用到颗粒和气溶胶的流体动力过程中. 气溶胶动力学最主要受到颗粒特性, 主要是大小和质量的影响 (Hinds 1999). 拉氏模型常常用于处理惰性颗粒 (即完全没有物理或化学反应). 一般的颗粒动力学, 如拖拽 (drag) 和沉积 (deposition) 等等, 大都已经处理得很好, 技术性问题大都是颗粒的数量跟电脑内存等的相关计算问题.

但是传统的颗粒物理和化学反应一般都是基于欧拉坐标 (Seinfeld & Pandis 2006), 气/固相浓度、温度等环境参数都会用到. 在这个技术要求下欧拉坐标比较合适. 处理颗粒的物理惰性 (如重力沉淀, gravitational settling), 最简单的方法就是漂移流密度模型 (drift flux model: Lai & Chen 2007, Ghiaasiaan 2008). 它假定颗粒的水平速度跟气相是完全一致的. 至于垂直速度, 为了处理重力沉淀 (gravitational settling), 颗粒的重力沉淀速度 (settling velocity) 被加到质量守恒 (mass conservation) 的对流项 (convective term) 中. 不同尺寸大小的颗粒, 因应不同的重力沉淀速度, 会被分配到有限的不同组 (bins) 中一并处理. 至于颗粒的物理和化学反应, 一般包括冷凝 (condensation)、蒸发 (evaporation) 和凝结 (coagulation), 都会利用一个源项 (source term) 处理. 以上方法都适用于一般的直接数值模拟 (DNS)、大涡模拟 (LES) 或雷诺平均数 (RANS) 模型.

运用漂移流密度模型必须留意两点. 第一, 在执行质量守恒时, 我们需要同时处理气相和固相的质量守恒方程式, 这样最基本的颗粒单扩散 (monodisperse) 法都会加重计算负担. 至于较复杂的颗粒多扩散 (polydisperse), 即在考虑不同颗粒大小、分配和它们之间的凝结时, 在固相的质量守恒方程式上必须同时兼顾质量浓度 (mass concentration) 和计数浓度 (number concentration) 和它们之间的物理反应. 这样就会进一步增加计算负担. 第二, 漂移流密度模型虽然简单, 但只适合较狭窄的颗粒尺寸分布谱. 如果要处理较宽阔的颗粒尺寸分布谱, 就必须用到更复杂的矩量法 (moment method) 求解气溶胶的一般的动态方程式 (aerosol general dynamic equations; Pratsinis 1988, Settumba & Garrick 2003). 这样计算负担增加, 对模型编码的要求会进一步提高.

我们知道某些过程时间尺度, 例如 PM_{10} 和 $PM_{2.5}$ 的凝结和冷凝/蒸发, 至少是数小时的量级 (Ketzel & Berkowicz 2004), 远长于一个排放的空气云团在 UCL 内的滞留

时间. 然而, UFP 的气溶胶动力过程的时间尺度与此滞留时间相当, 或者更短. 正因为如此, 并且事实上 UFP 的研究近来已经引起了极大的关注, 针对 UFP 的气溶胶动力过程和湍流的耦合正成为一个新兴的课题. Nikolova 等 (2011) 耦合了 UFP 总数浓度与三维 RANS 建筑物分辨的模型——ENVI-met® (ENVI-met® 已经具有处理 PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$ 和碳元素的功能). 该模型被用于比利时安特卫普的现场测量. 结果表明, 在街道峡谷内的 UFP 浓度可以比城市背景浓度高得多, 这表明 UFP 数浓度在很大程度上受当地交通的影响. Nikolova 等 (2014) 进一步开发了一个 UFP 模型. 该模型考虑了 UFP 共 12 组颗粒尺寸, 并且和 ENVI-met® 耦合. 其气溶胶动力过程考虑了凝结 (coagulation)、冷凝 (condensation) 和沉积 (deposition), 而成核 (nucleation) 现象被假定涵盖在颗粒尺寸分辨的排放过程中. 使用这种类型的模型, 一个是能够研究交通排放的 UFPs 如何扩散以及和背景空气混合, 以评估沉积和凝结对超微颗粒大小分布的重要性. 在这个模型中, 城市街道峡谷流中 UFP 的数浓度和颗粒尺寸分布一起被模拟了. 到目前为止, 这是世界上为数不多的此类研究之一.

8 对于解决城市尺度大气污染问题的讨论和展望

8.1 讨论

需要强调的是, 这篇综述仅仅简要总结了笔者及合著者十多年来在这方面的的工作, 同时提及了非常有限数量的一些相关学者的研究. 这些工作和研究着重于英国、欧洲其他国家以及香港. 对于中国内地在这方面的研究, 崔桂香等 (2013) 已经有了很好的综述, 本文没有再尝试强调. 所以, 这篇综述是非常不全面的. 譬如城市周围复杂地形 (Fernando 2010), 对于中国很多城市的大气环境是非常重要的影响因素之一, 本文也没有尝试讨论.

也许, 一篇综述文章并不需要面面俱到. 本文通过“基于牛顿流体的数值环境风洞”这一条主线, 综述了几个重点和难点问题. (1) 建立简单的城市建筑物群模型, 包括高层建筑 (群), 以期深入理解其物理本质. (2) 天气尺度 (meso-scale) 和街道尺度耦合计算; 这不仅是提高计算精度的一个方法, 也是集成不同学科专门知识的一条捷径, 譬如气象学、力学、物理学、计算科学等等. (3) 化学反应和湍流的耦合计算和气溶胶动力学过程, 这也是一个多学科交叉的领域. (4) 在极端天气下的污染物浓度极值的预报, 特别考虑温度稳定性层结效应. 例如城市上空逆温层影响. 虽然中国和英国的城市大气环境问题的侧重点有所不同, 但是科学问题是一致的. 希望本文对研究中国城市大气环境问题有所借鉴.

气相和微颗粒污染物在城市大气边界层中的传输扩散涉及力学、物理学、化学和气象学等多学科. 其物理和化学过程和湍流以及天气状况紧密耦合, 因而极其复杂. 该

问题在空间尺度上的跨度是微米 (10^{-6} m) 量级到数百公里 (10^5 m) 量级; 在时间尺度上的跨度是毫秒 (10^{-3} s) 甚至微秒 (10^{-6} s) 到数小时 (10^4 s) 甚至数天 (10^5 s) 的量级. 建立各种尺度的可靠计算模型, 并且考虑模型 – 模型之间的耦合计算是唯一的可行办法. 这些学科内的研究人员需要全力合作, 共享数据, 在机理上深入研究, 为建模和防治提供依据.

8.2 展望

Fernando (2010) 例举了一些阻碍研究城市大气环境系统且需重点工作的领域, 包括考虑城市几何形状的非均匀性 (heterogeneous) 构建中尺度模式中的亚格子模型; 参数化快速变化的 (非平衡) 大气中的流动, 譬如在时间上 (过渡流) 和在空间上 (城市冠层边缘); 量化城市冠层顶部的湍流, 污染物和热的运输过程; 模拟真实城市几何形状, 计算街道尺度高分辨率的湍流和污染物扩散; 使用嵌套网格的多尺度模型; 制定关键的城市特性的测量协议. 笔者和合著者在本文前面综述的工作, 基本上覆盖了 Fernando (2010) 列举的重点领域.

针对解决中国城市大气污染的紧迫性, 我们认为近期的重点有:

(1) 模拟和量化城市建筑物布局 and 建筑高度分布对于污染物 (气相和颗粒物) 和热的总体/局地扩散输运系数的影响, 以指导提高城市内能源使用效率, 降低排放, 提高城市冠层内通风, 降低局地极端污染物浓度. 这需要对整个城市区域做整体模拟预报.

(2) 特别要模拟量化天气条件 (例如热层结和风向变化) 对于污染物 (气相和颗粒物) 和热的总体/局地扩散输运系数的影响, 同时要考虑全球气候变化对某些方面加剧的影响.

(3) 确定主要的排放源和它们的详细污染物成分, 并形成可靠的共享的数据库可用于改进高分辨率城市和中尺度模型参数化方案, 以用于找到的雾霾形成的主要因素及指导显著降低雾霾出现的几率.

(4) 重点研究在燃油或煤在燃烧中的燃油质量和煤成分对污染物排放的影响, 研究不同燃料、燃烧条件下污染物生成抑制原理及污染物低温高效脱除方法.

这些需要结合数值计算, 譬如数值环境风洞 NEWTON (着重研究 1 m 到 1 km 甚至 10 km 量级尺度范围), 物理风洞/水槽实验, 关键的城市特性的测量数据, 降低污染物排放的新技术的研制等. 大力改善城市大气环境是一个长期的繁杂的系统工程, 虽然问题极其紧迫, 但是急躁不得, 需要细致的长期规划, 科学管理和技术双管齐下.

致谢 英国国家大气科学中心 (NCAS/NERC)(R8/ H12/38) 和 EPSRC (EP/K04060X/1) 资助项目. 这项研究使用的超级计算级系统有南安普顿大学的 IRIDIS 系列和英国的国家超级计算机系统 HECToR, HPCx, CSAR 系列; 计算软件平台有笔者和合作者研

发的 FASToLES、商业程序 Star-CD4.0 和 Fluent、开源程序 OpenFOAM。笔者要感谢所有的合作者对该文的贡献, 其中特别有, 李家春教授, Profs Peter Voke, Alan Robins, Ian Castro, Janet Barlow, Stephen Belcher, Drs C-H Moeng, Bharathi Boppana, Yusik Kim, Omduth Coceal, Paul Hayden, Curtis Wood, Fred Mendonca, Mr Steven Daniels。笔者还要感谢两位匿名审稿人提出的批评和建设性的意见。

参考文献

- 崔桂香, 张兆顺, 许春晓, 黄伟希. 2013. 城市大气环境的大涡模拟研究进展. *力学进展*, **43**: 295-328
(Cui G X, Zhang Z S, Xu C X, Huang W X. 2013. Research advances in large eddy simulation of urban atmospheric environment. *Advances in Mechanics*, **43**: 295-328)
- Arnold S, ApSimon H, Barlow J, Belcher S, Bell M, Boddy D, Britter R, Cheng H, Clark R, Colville R, Dimitroulopoulou S, Dobre A, Grealley B, Kaur S, Knights A, Lawton T, Makepeace A, Martin D, Neophytou M, Neville S, Nieuwenhuisen M, Nickless G, Price C, Robins A, Shallcross D, Simmonds P, Smalley R, Tate J, Tomlin A, Wang H, Walsh P. 2004. Dispersion of air pollution & penetration into the local environment - DAPPLE. *Science of the Total Environment*, **332**: 139-153.
- Atkinson R W, Fuller G W, Anderson H R, Harrison R M, Armstrong B. 2010. Urban ambient particle metrics and health a time-series analysis. *Epidemiology*, **21**: 501-511.
- Baik J J, Kang Y S, Kim J J. 2007. Modeling reactive pollutant dispersion in an urban street canyon. *Atmospheric Environment*, **41**: 934-949.
- Baker J, Walker H L, Cai X M. 2004. A study of the dispersion and transport of reactive pollutants in and above street canyons - a large eddy simulation. *Atmospheric Environment*, **38**: 6883-6892.
- Baker C J. 2007. Wind engineering—past, present and future. *J Wind Eng Ind Aerodyn*, **95**: 843-870.
- Berkowicz R. 2000. OSPM - A parameterised street pollution model. *Environmental Monitoring and Assessment*, **65**: 323-331.
- Blocken B. 2013. 50 years of computational wind engineering: past, present and future. In: Owen J, Sterling M., Hargreaves D, Baker C J, eds. *Fifty Years of Wind Engineering*, (Prestige Lectures from the Sixth European and African Conference on Wind Engineering, UK).
- Boppana V B L, Xie Z T, Castro I P. 2010. Large-eddy simulation of dispersion from surface sources in arrays of obstacles. *Bound.-Layer Meteorol*, **135**: 433-454.
- Boppana V B L, Xie Z T, Castro I P. 2013. Large-eddy simulation of heat transfer from a single cube mounted on a very rough wall. *Bound.-Layer Meteorol*, **147**: 347-368.
- Boppana V B L, Xie Z T, Castro I P. 2014. Thermal stratification effects on flow over a generic urban canopy. *Boundary Layer Meteorology*, **153**: 141-162.
- Boppana V B L, Xie Z T, Castro I P. 2014. Wind direction effects on urban flows. In: *Int Sym Comp Wind Eng*, Hamburg.
- Boris J, Patnaik G, Obenschain K. 2011. Naval Research Laboratory Report, NRL/MR/6440-11-9326.
- Bright V B, Bloss W J, Cai X. 2013. Urban street canyons: Coupling dynamics, chemistry and within-canyon chemical processing of emissions. *Atmospheric Environment*, **68**: 127-142.
- Cheng H, Castro I P. 2002. Near wall flow over urban-like roughness. *Bound.-Layer Meteorol*, **104**: 229-259.
- Chung TNH, Liu CH. 2013. On the mechanism of air pollutant removal in two-dimensional idealized street canyons: A large-eddy simulation approach. *Bound.-Layer Meteorol*, **148**: 241-253.

- Cochran L, Derickson R. 2011. A physical modeler's view of computational wind engineering. *J Wind Eng Ind Aerodyn*, **99**: 139-153.
- Dagnew A K, Bitsuamlak G T. 2010. LES evaluation of wind pressures on a standard tall building with and without a neighboring building. In: The 5th Int. Sym. Comput. Wind Eng., Chapel Hill (NC), USA.
- Daniels S J, Castro I P, Xie Z T. 2013. Peak loading and surface pressure fluctuations of a tall model building. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, **120**: 19-28.
- Daniels S J, Castro I P, Xie Z T. 2014. A novel monolithic approach to fluid structure interactions. In: Int. Sym. Comp. Wind Eng., Hamburg.
- Donaldson K, Tran L, Jimenez L A, Duffin R, Newby D E, Mills N, MacNee W, Stone V. 2005. Combustion-derived nanoparticles: A review of their toxicology following inhalation exposure. *Particle and Fibre Toxicology*, **2**: 10.
- Fernando H J S. 2010. Fluid dynamics of urban atmospheres in complex terrain. *Ann Rev. Fluid Mech.*, **42**: 365-89.
- Ghiaasiaan S M. 2008. Two-Phase Flow, Boiling, and Condensation. Cambridge University Press, New York, NY, USA.
- Grawe D, Cai X M, Harrison R M. 2007. Large eddy simulation of shading effects on NO₂ and O₃ concentrations within an idealised street canyon. *Atmospheric Environment*, **41**: 7304-7314.
- Hang J, Li Y. 2012. Macroscopic simulations of turbulent flows through high-rise building arrays using a porous turbulence model. *Building and Environment*, **49**: 41-52.
- Huang S H, Li Q S, Xu S. 2007. Numerical evaluation of wind effects on a tall steel building by "CFD". *J. Construct. Steel Res*, **63**: 612-627.
- Hinds W C. 1999. Aerosol Technology: Properties, Behaviors, and Measurements of Airborne Particles, 2nd Edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, NY.
- Jenkin M E, Saunders S M, Pilling M J. 1997. The tropospheric degradation of volatile organic compounds: A protocol for mechanism development. *Atmospheric Environment*, **31**: 81-104.
- Ketzel M, Berkowicz R. 2004. Modelling the fate of ultrafine particles from exhaust pipe to rural background: An analysis of time scales for dilution, coagulation and deposition. *Atmospheric Environment*, **38**: 2639-2652.
- Kikumoto H, Ooka R. 2012. A numerical study of air pollutant dispersion with bimolecular chemical reactions in an urban street canyon using large-eddy simulation. *Atmospheric Environment*, **54**: 456-464.
- Kim M J, Park R J, Kim J J. 2012. Urban air quality modeling with full O₃-NO_x-VOC chemistry: Implications for O₃ and PM air quality in a street canyon. *Atmospheric Environment*, **47**: 330-340.
- Kim Y, Castro I P, Xie Z T. 2013. Divergence-free turbulence inflow conditions for large-eddy simulations with incompressible flow solvers computers and fluids. *Comput. Fluids*, **84**: 56-68.
- Lai A C K, Chen F Z. 2007. Comparison of a new Eulerian model with a modified Lagrangian approach for particle distribution and deposition indoors. *Atmos. Environ.*, **41**: 5249-5256.
- McHugh C A, Carruthers D J, Edmunds H A. 1997. ADMS-Urban: An air quality management system for traffic, domestic and industrial pollution. *International Journal of Environment and Pollution*, **8**: 666-674.
- Moonen P, Blocken B, Roels S, Carmeliet J. 2006. Numerical modeling of the flow conditions in a closed-circuit low-speed wind tunnel. *J Wind Eng Ind Aerodyn*, **94**: 699-723.
- Moeng C H, Dudhia J, Klemp J, Sullivan P. 2007. Examining two-way grid nesting for large eddy simulation of the PBL using the WRF model. *Monthly Weather Review*, **135**: 2295-2311.

- Moss G F, Wardlaw R L. 1970. A standard tall building model for comparison of simulated natural wind in wind tunnels. Technical Report C.C.662m Tech.25. C.A.A.R.C.
- Murakami S. 1998. Overview of turbulence models applied in CWE - 1997. *J. Wind Eng. Ind. Aerod.*, **74**: 1 - 24,
- Nikolova I, Janssen S, Vos P, Berghmans P. 2014. Modelling the mixing of size resolved traffic induced and background ultrafine particles from an urban street canyon to adjacent backyards. *Aerosol and Air Quality Research*, **14**: 145-155.
- Nikolova I, Janssen S, Vos P, Vrancken K, Mishra V, Berghmans P. 2011. Dispersion modelling of traffic induced ultrafine particles in a street canyon in Antwerp, Belgium and comparison with observations. *Science of the Total Environment*, **412**: 336-343.
- Oberdorster G, Utell, M J. 2002. Ultrafine particles in the urban air: To the respiratory tract - and beyond? *Environmental Health Perspectives*, **110**: A440-A441.
- Owen J, Sterling M, Hargreaves D, Baker C J, eds. 2013. Fifty Years of Wind Engineering (Prestige Lectures from the Sixth European and African Conference on Wind Engineering, UK).
- Pascheke F, Barlow J F, Robins A. 2008. Wind-tunnel modelling of dispersion from a scalar area source in urban-like roughness. *Bound.-Layer Meteorol*, **126**: 103-124.
- Pratsinis S E, Vemury S. 1996. Particle formation in gases: a review. *Powder Technology*, **88**: 267-273.
- Richards K, Schatzmann M, Leidl B. 2006. Wind tunnel experiments modelling the thermal effects within the vicinity of a single block building with leeward wall heating. *J Wind Eng Ind Aerodyn*, **94**: 621-636
- Seinfeld J H, Pandis S N. 2006. Atmospheric Chemistry and Physics: from Air Pollution to Climate Change, John Wiley & Sons, New York, NY.
- Settumba N, Garrick S C. 2003, Direct numerical simulation of nanoparticle coagulation in a temporal mixing layer via a moment method. *J. Aerosol Sci.*, **34**: 149-167.
- Soulhac L, Salizzoni P, Cierco F X, Perkins R. 2011. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; Part I, presentation of the model. *Atmos. Environ.*, **45**: 7379-7395.
- Sullivan P P, McWilliams J, Moeng C H. 1996. A grid nesting method for large-eddy simulation of planetary boundary-layer flows. *Bound.-Layer Meteorol.*, **80**: 167-202.
- Tamura Y, Pham V P. 2014. Development of “CFD” and applications: monologue by a non-CFD-expert. In: Int. Sym. Comp. Wind Eng., Jun, 2014, Hamburg.
- Wood C R, Lacser A, Barlow J F, Padhra A, Belcher S E, Nemitz E, Helfter C, Famulari D, Grimmond C S B. 2010. Turbulent flow at 190 metres above London during 2006-2008: A climatology and the applicability of similarity theory. *Bound-Layer Meteorol*, **137**: 77-96.
- Wright N G, Hargreaves D M. 2013. Environmental Applications of Computational Fluid Dynamics. In: Wainwright J, Mulligen M, eds. Environmental Modelling: Finding Simplicity in Complexity, 2nd Edition. Wiley.
- Xie Z T, Castro I P. 2008. Efficient generation of inflow conditions for LES of street-scale flows. *Flow, Turb. & Com.*, **81**: 449-470.
- Xie Z T, Coceal O, Castro I P. 2008. Large-eddy simulation of flows over random urban-like obstacles. *Bound-Layer Meteorol*, **129**: 1-23
- Xie Z T, Voke P R, Hayden P, Robins A G. 2004. Large-eddy simulation of turbulent flow over a rough surface. *Bound.-Layer Meteorol*, **111**: 417-440.
- Xie Z T, Castro I P. 2006. LES and RANS for turbulent flow over arrays of wall-mounted obstacles. *Flow Turbul Combust*, **76**: 291-312.

- Xie Z T, Castro I P. 2008. Efficient generation of inflow conditions for large-eddy simulation of street- scale flows. *Flow, Turbul. Combust*, **81**: 449-470.
- Xie Z T, Castro I P. 2009. LES for flow and dispersion in urban streets. *Atmos. Environ.*, **43**: 2174-2185.
- Xie Z T. 2011. Modelling street-scale flow and dispersion in realistic winds - towards coupling with mesoscale meteorological models. *Bound.-Layer Meteorol.*, **135**: 433-454.
- Xie Z T, Hayden P, Robins A G, Voke P R. 2007. Modelling extreme concentration from a source in a turbulent flow over rough wall. *Atmospheric Environment*, **41**: 3395-3406.
- Xie Z T, Hayden P, Wood C R. 2013. Large-eddy simulation of approaching-flow stratification on dispersion over arrays of buildings. *Atmospheric Environment*, **71**: 64-74.
- Zhong J, Cai X M, Bloss W J. 2014. Modelling segregation effects of heterogeneous emissions on ozone levels in idealised urban street canyons: Using photochemical box models. *Environmental Pollution*, **188**: 132-143.

(责任编辑: 周济福)

Modelling gas and PM pollutant dispersion in urban environments

XIE Zheng-Tong^{1,†} LIU Chun-Ho² CAI Xiaoming³

¹ Faculty of Engineering and the Environment, University of Southampton, UK

² Department of Mechanical Engineering, University of Hong Kong, HK, China

³ School of Geography, Earth and Environmental Sciences, University of Birmingham, UK

Abstract Dispersion of gas and particulate matter (PM) pollutant in urban environments is a rising concern. Physical and numerical modelling is extremely challenging due to a number of parameters involved including the turbulence nature and complex physical and/or chemical processes. The paper attempts to review the latest advances on this topic. The major contents are: using generic geometry models to understand the mechanism, coupling meso-scale (weather scale) and micro-scale (street scale) large-eddy simulations, effects of thermal stratification, effects of tall buildings, modelling extreme pollutant concentration in extreme conditions and coupling chemistry with turbulence. This paper focuses more on the progress of the numerical model study in the UK and Europe.

Keywords weather scale, thermal stratification, extreme weather, extreme pollutant concentration, street canyon model, chemical processes, coupling

Received: 3 February 2015; accepted: 15 July 2015; online: 23 July 2015

[†] E-mail: z.xie@soton.ac.uk

Cite as: Xie Z T, Liu C H, Cai X M. Modelling gas and PM pollutant dispersion in urban environments. *Advances in Mechanics*, 2015, 45: 201510

© 2015 *Advances in Mechanics*.



Dr. Zheng-Tong Xie is an Associate Professor in the University of Southampton. As the PI, he has won a few awards from EPSRC, NCAS/NERC and ARCHER eCSE, and a few Studentships from industry, such as Arup and DSTL. These projects mainly focus on air pollutant dispersion and heat transfer in urban environments. So far he has published more than 30 papers in leading journals. He is a Fellow of the Royal Meteorology Society, and an Executive Committee member of the UK Wind Engineering Society. In 2012 he co-organised the UK Wind Engineering Conference and has been session chairman and scientific committee member in a number of international conferences and workshops. Zheng-Tong Xie studied for a Bachelor degree in Engineering Mechanics from 1986-1990 at Shanghai Jiao Tong University (SJTU). He did his Masters degree in 1990-1992 (thesis: A numerical simulation of unsteady response to a gust for a wing-tail combination) and a PhD in 1992-1995 (thesis: Numerical simulations and water tunnel experiments for modelling hydrodynamic characteristics of cavitating axisymmetric bodies at small angles of attack), both at SJTU. He moved to Beijing to work as a Post Doctoral Researcher and was then promoted to Associate Professor at the Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, working on Large Eddy Simulations for atmospheric boundary layer flows (1995-2000). He has been continuing working on Large Eddy Simulations for air pollutant dispersion and wind engineering problems since then. From 2000 to 2004 he took up a position as Research Fellow in the University of Surrey. He moved to Southampton as a Senior Research Fellow in 2004.



Dr. Chun-Ho Liu is an Associate Professor in the University of Hong Kong (HKU). He received PhD, BEng degrees in HKU. Dr. Liu taught in Hong Kong Polytechnic University before joining HKU in 2007. His core research interests are air pollution physics/chemistry, geophysical turbulence and scientific computing. Currently he attempts to improve our understanding of the air pollutant dispersion mechanism over urban areas.



Dr. Xiaoming Cai is a Senior Lecturer in School of Geography, Earth & Environmental Sciences, University of Birmingham, with the experience of meso- and micro-scale numerical modelling and large-eddy simulation (LES) of turbulence in the atmospheric urban boundary layer and in urban street canyons (including the dispersion of air pollutants in urban environment). In particular, he developed a street-canyon LES model capable of coupling turbulence with photochemical reactions. He currently participates in an EU project and aims to develop an LES model coupling with aerosol dynamics in order to improve our understanding of the processes affecting the evolution of size and chemical composition of traffic emitted ultrafine particles in the urban boundary layer.