

天津大学

硕士学位论文

污染物对建筑小区影响的数值模拟

姓名：李莉

申请学位级别：硕士

专业：环境科学

指导教师：尤学一

20060201

中文摘要

随着我国城市化进程的快速发展及生态环境的不断恶化,异常天气(大风、沙尘暴、持续高温等)和传染性疾病的出现日益频繁,人口密度很高的建筑群产生的环境安全性问题也随之日益突出,已经威胁人民的生命安全。对建筑小区周围的大气污染物扩散规律及非稳态微生物污染物的扩散规律的研究,成为目前研究的重要领域之一。

本文采用数值模拟方法研究污染物对建筑小区的影响。首先,通过二维街道峡谷模型模拟了开放环境、城市环境下的街道峡谷中污染物扩散为例,研究了建筑物间污染扩散数值模拟的三个基本问题,即计算域、最优 $k-\varepsilon$ 湍流模型和结构网格和非结构网格的选取问题。确定了 RNG $k-\varepsilon$ 湍流模型为这类模拟的最优模型。

利用 RNG $k-\varepsilon$ 湍流模型模拟了二维水平面单建筑物和双排多建筑物情况下的稳态点源污染物浓度分布。发现污染物的迁移扩散是由建筑物周围的风速场及湍流扩散系数确定的。通过优化建筑物的分布位置,可以有效地减少污染源在小区内高浓度分布区域。并且,在一定条件下,二维水平面模型结果可定性反映三维模型结果,提出以二维模拟为指导,三维模型来确定的优化数值方法。

而后,利用二维模型,模拟了不同位置九建筑小区情况下,稳态线源污染物的浓度分布,找出了其中最有利于污染物扩散的结构和位置。

最后,本文首次将微生物生长动力学模型引入到空气质量模型。将微生物污染物考虑为非稳态污染源,进行扩散模拟,得到了微生物污染物的影响范围,建立了传染病的预警系统。这种做法国内外尚未见报道。在研究该生长动力学模型时,尝试了一种动力学方程组的参数反求方法,并利用计算机图形识别技术为之服务。

总之,本文研究结果将为建筑小区的抗污染结构设计、城市大气质量多尺度模型的建立,空气中传播的有害微生物扩散预警模型提供理论依据。

关键词: $k-\varepsilon$ 湍流模型 建筑群结构 扩散 非稳态微生物污染源

ABSTRACT

This paper is directed towards a deeper understanding of pollutant dispersion with respect to various simple building configurations by using the commercial CFD package-FLUENT.

Taking an isolated street canyon (open country roughness and urban country roughness) as an example, a two-dimensional numerical model is developed to study the three basic problems in the simulation of the flow and pollutant dispersion within buildings. The three basic problems are the determination of suitable computational domain, the optimal $k-\varepsilon$ turbulence model and the choice of structure grid and unstructured grid. The RNG $k-\varepsilon$ turbulence model is found to be the optimal turbulence model in this kind of approach.

A two-dimensional numerical model with RNG $k-\varepsilon$ turbulence model is developed to simulate the wind flow and pollution concentration around single building and parallel building column configurations. It is found out that the pollutant diffusion is determined by the wind speed and local turbulent diffusivity. By arranging the position of buildings, the area of high pollutant concentration can be reduced efficiently. An optimal numerical simulation strategy based on the two-dimensional model is proposed to replace the three-dimensional numerical model as a prepare approach in some conditions. After the two-dimensional model obtains the optimal plan, the three-dimensional model is used to check up the above optimal plan of two-dimensional results and determines it finally.

A two-dimensional numerical model considering line pollutant source is adopted to simulate the pollutant diffusion within three positions of nine buildings configuration. The optimized building configurations for pollutant diffusion are found in this research.

The population dynamic model of virus infection is introduced in the air quality model as an unsteadily pollutant source for the first time. The virus dispersion and possible infection area are obtained. A virus alarm system is established. An inverse mathematical method and graphics recognition technology are proposed to determine the parameters of non-linear population dynamic model with known experimental data.

KEY WORDS: $k-\varepsilon$ turbulence model, building configurations, diffusivity, unsteadily microbe source

独创性声明

本人声明所呈交的学位论文是本人在导师指导下进行的研究工作和取得的研究成果，除了文中特别加以标注和致谢之处外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得 天津大学 或其他教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

学位论文作者签名：李莉

签字日期：2006 年 2 月 8 日

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解 天津大学 有关保留、使用学位论文的规定。特授权 天津大学 可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，并采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编以供查阅和借阅。同意学校向国家有关部门或机构送交论文的复印件和磁盘。

(保密的学位论文在解密后适用本授权说明)

学位论文作者签名：李莉

导师签名：尤子一

签字日期：2006 年 2 月 8 日

签字日期：06 年 2 月 8 日

第一章 绪论

1.1 研究背景及意义

随着我国城市化进程的快速发展,大量(高层)建筑群已经兴建或即将兴建。同时,由于生态环境的不断恶化,异常天气(大风、沙尘暴、持续高温等)和传染性疾病的出现日益频繁,人口密度很高的建筑群产生的环境安全性问题也随之日益突出,已经威胁了人民的生命安全。例如,去年北京就曾出现由于高层建筑位置安排不合理,导致建筑物间的超大风速伤人事件。在非典时期,香港陶大花园发生的大量人员染病^[1],从发病人员多分布在病源的下风向建筑物中,也证实高层建筑位置不合理安排会导致被感染人数大幅增加。建筑物的位置安排不合理还会导致许多其它严重问题,如污染物扩散难、城市热岛等。同时,随着社会的进步和经济的发展,人们的生活水平的不断提高,现代人们对居住建筑环境的要求也越来越高,因而对建筑物周围环境质量也提出了更高的要求。因而,建筑群产生的环境安全问题研究不但具有重大的理论意义,而且具有深远的现实意义和应用前景。建筑小区周围的大气污染物的扩散规律,及非稳态微生物污染物的扩散规律,都是目前重要的研究领域之一。

1.1.1 建筑小区内大气污染物扩散规律的研究

建筑小区内大气污染物的扩散,是指在确定的小区内,根据风向、风速、污染源位置、污染量等因素,来确定小区内部污染物扩散规律,并以此对建筑物的形状及建筑群结构设计提供科学的依据。传统的研究污染物扩散规律的方法有风洞模型实验的模拟、现场测量等,得出经验或半经验的公式,然后在这些公式的基础上预测污染物流动状况。由于模型实验不仅耗费人力、物力,而且受模型实验的条件限制,有时难以模拟出复杂的空间流动的全部特征;即使是同样的外界条件,可能的楼房建筑的模式也会有许多,想通过实验的方法来确定各种方案的优劣显然是不现实的,也是不经济的。随着计算机技术的发展和高速计算机的应用,研究合理的建筑小区结构的数值模拟方法,就成为建筑结构优越性设计的重要方向。

以建筑空间为对象的计算机数值模拟,在一些国家得到广泛的应用,特别是计算流体力学(CFD)技术的在研究建筑物周围风场及压力场中的应用,是目前

国际上一个重要的研究领域。该领域的研究为用 CFD 技术模拟建筑小区间的污染物扩散打下了基础。CFD 技术对于模拟污染源的无组织排放、汽车尾气以及突发灾害性事件在街道、居民小区^[2-3]、工业和居民混合区造成的污染等情况也是非常适用的。这些研究均可为合理规划城市、缓解日益严重的城市空气污染,特别是城市小区空气污染问题提供重要的指导。

CFD 技术在空气质量模型中的应用,主要集中在城市建筑小区尺度(数十米至数百米水平范围,数十分钟)模型的研究中。该尺度下建立的污染物扩散空气质量模型中,对建筑物单体及建筑群周围空气流动场的模拟是至关重要的,这正是 CFD 技术的特长之处。用 CFD 技术可以准确的模拟出建筑单体四周的流场状况、一组建筑物四周的流场特征,从而摸清一个或一组建筑四周的情况,一栋楼四周哪里容易风小,哪里容易风大,由于建筑物形状的不同污染物是怎么分布的等等。以上模拟都将有助于摸清污染物扩散的规律^[4-5],从而达到最大程度上控制污染的目的。

目前国际上公认的污染物在建筑小区中的数值模拟是街道峡谷模型,该模型不仅具有实际意义,而且简单的结构,使得其在二维情况下,就可获得准确的定量结果,如该模型中单一街道峡谷污染物扩散的一般规律、一系列街道峡谷的污染物扩散规律、热影响因素对污染物扩散的作用、街道峡谷两边建筑物不同形状的影响等研究都已取得了有意义的结果,同时也有人考虑了部分气象因素对街道峡谷污染物扩散的影响作用,并提出了有利于污染物扩散的街道结构改进建议。但是,在关于街道峡谷内污染物扩散的定量研究中,还有一些值得关注的地方容易被忽略,如模型计算域的确定、大气边界条件的选取等问题,这些问题都会对结果的准确性产生影响。为此,本文在定量数值模拟时,对这几个问题作了进一步的研究。

对于建筑单体及建筑小区污染物扩散规律的研究,现有文献不多,这方面的研究还处于不成熟阶段,比如污染物在建筑物周围扩散规律的讨论都只是讨论了其影响因素的部分方面,要对其关系进行全面的研究,还有很多工作要做。另外,从建筑物形状及建筑群结构的多样性来看,即使对于没有污染物存在的建筑群风场的研究也很不全面,如在北京城市规划建设与气象条件及大气污染关系的研究中^[6]对方庄芳星园小区周围风场的研究、M.TUTAR 的规则九建筑风场的研究等,研究的也只是一些简单的基本形状。以上这些因素都证明了建筑小区的污染物扩散研究还有很大的发展空间。为此,本文研究了一些理想结构的建筑小区,选择了点源和线源两种污染源形式进行了污染物扩散的模拟研究,力图在研究中找到一些污染物扩散的共同规律,为设计有利于污染物扩散的建筑小区模式提供参考和依据。

建立污染物在建筑小区中的扩散模型,除了研究不同结构小区的影响规律外,最终也要实现模型的准确定量。由于空气通过建筑物的流动存在钝体绕流现象,因此,必须采用三维非稳态湍流模型才能更好的模拟出各时刻的污染物扩散状况。但是,三维模型下非稳态的模拟是非常费时的,尤其在研究不同结构建筑小区与污染物扩散关系的比较中,或在有多种可选择的优化方案时,为了能尽快的实现这一目标,都需要一套省时的研究方法。考虑到大气污染物扩散模型的特性及二维模型计算速度上的优势,本文想建立一种通用的模型建立方法,即二维模型研究污染物扩散规律、三维模型最终定量的方法,从而大大的提高模型的建立效率。类似的研究法国内外尚未见报道。

1.1.2 微生物非稳态污染扩散的研究

在通过计算机模拟建筑物周围空气污染物的扩散时,除了稳态污染物之外,像道路上的汽车尾气排放、烟囱的不定时排放等非稳态污染物的扩散规律也是不容忽视的。尤其是一些可在空气中传播的、致病性微生物污染物的扩散^[7],许多实验证实,这些可通过呼吸道传染的疾病,其可以由咳嗽和喷嚏产生的微生物气溶胶直接感染易感者^[7]。如果有病源出现,则会产生致病性气溶胶,从而使空气中有害微生物的含量升高,室内空气环境质量下降。同时,大量致病性气溶胶通过与室外的气体交换,释放到周边环境,并借助于气流流动传向远方,造成周边环境的生物污染以及气源性传染。当该微生物可在空气中存活较长时间的话,其会以气溶胶的形式随风扩散到几十甚至上百公里的地方。这种致病性微生物,如流行于人类的天花、麻疹、流行性腮腺炎、非典型性肺炎(SARs)及流行于家畜的疯牛病、口蹄疫(FMD)、猪瘟疫、禽流感^[8]等,都曾给人们带来极大的危害^[9]。2002年11月在我国发生非典型性肺炎(SARs)迅速蔓延到28个国家,截至2003年6月13日,全世界的SARS病例已达8454人,其中792人死亡,我国病例高达5327人,343人死亡,在流行高峰期间,北京市每日新增患病人数高达百人以上;急性呼吸道感染每年造成400万儿童死亡。可在空气中传播的致病性微生物引起的传染病给人类带来了巨大的威胁,对其传染规律和防治策略研究的重要性日益突出,是当今世界需要迫切解决的一个问题。

我国学者对空气微生物污染公用物品及致病问题,已经进行了广泛的研究,取得了一些进展,并提供了很多宝贵的数据^[10],国外这方面的报道也不少,但是这些研究多以实验方法为主,由于研究空气微生物的实验方法很多,用到的仪器也不一样,实验数据相对差别较大等,仍存在许多需要解决的问题。因此,采用数值模拟和实验方法结合是较好的选择。

有害微生物气溶胶在空气中扩散的数值模拟,欧洲科学家最早应用到口蹄疫

的研究中^[11-13]。Donaldson 的研究小组在病毒扩散过程中引入了高斯烟羽扩散模型,考虑了风速的影响,模拟了欧洲地区 80 年代和 2001 年爆发的口蹄疫实例,预测了以空气为传播介质的传染病的影响范围,研究同时考虑了各种气象、地形因素的修正。香港科学家将高斯扩散模型引入到 SARS 病毒的研究中,利用计算流体力学软件如 CFD、FLUENT,根据非典时期的收集的数据对香港一楼区的 SARS 扩散作出模拟研究^[14]。这些发展都将为用计算机更精确的模拟微生物气溶胶在空气中的扩散提供条件。然而,研究仍然存在很多困难。影响气溶胶在空气中扩散的因素有很多,除了病源的位置、环境风速、温度和湿度等因素之外,还有微生物气溶胶自身的一些特性,如微生物气溶胶来源、种类的多样性、活力易变性、传播三维性、沉积再生性及传染的广泛性,都是研究的难点。

以上关于微生物气溶胶扩散的研究,大多都将扩散源强设为定值。但是,对于微生物来说,只要条件充分,其在宿主体内便是不断繁衍变化的。同时,虽然目前对微生物在环境中是否能繁殖还没有定论,但可以肯定的是,将微生物自身的生长变化引入模型,可增加模型的准确性。因此,本研究中,将用病毒群体动力学模型来模拟微生物自身的生长,并以此作为源强,进行非稳态的微生物气溶胶扩散模拟,该方法国内外尚未见报道。

另外,在研究病毒感染群体动力学方程组时,遇到了参数反求问题。由于该方程组的一些特殊性,没有成熟的方法可以借鉴,为此,本文综合了多种数值计算方法,进行了反求参数的尝试,并将计算机的图形识别功能拿来为参数反求服务。计算机图形识别由于增加了计算所需数据量,其必将在复杂曲线的拟合、参数反求中发挥作用。这种做法也是有一定创新意义的。

1.2 计算流体力学 (CFD) 软件 FLUENT 简介

计算流体力学 (Computational Fluid Dynamics, 简称为 CFD) 是通过计算机数值计算和图像显示,对包含有流体流动和热传导等相关物理现象的系统所作的分析。随着计算机的推广普及和计算方法的发展,几十年来 CFD 取得了蓬勃的发展。由于数值模拟相对于实验研究有很独特的优点,比如成本低,周期短,能获得完整的数据,能模拟出实际运行过程中各种状态,对设计、改造等商业或实验室应用起到重要的指导作用,故 CFD 技术得到了越来越多的应用^[15]。

CFD 通用软件包的出现与商业化,对 CFD 技术在工程中应用的推广起了巨大的促进作用。1998 年,全球市场占有率最高的 CFD 软件—FLUENT 正式进入中国市场,其市场占有率达 40% 左右^[16]。

FLUENT 软件由美国 FLUENT 公司于 1983 年推出的,继 PHOENICS 软件之后的

第二个投放市场的基于有限容积法的软件,是处于世界领先地位的 CFD 软件。FLUENT 软件拥有多种优化的物理模型,如理想气体、真实气体模型、多种燃烧模型、污染物生成模型(包括 NO_x生成及煤灰生成模型)、各种物性参数、旋转系统模型、传热模型、多相流模型、针对外流场与内流场的特定的边界条件等。另外,FLUENT 软件包含了 8 种工程上常用的湍流模型(一方程模型、双方程模型、雷诺应力模型和大涡模拟等)。每一种模型又有若干子模型,FLUENT 提供比其它任何软件都丰富的物理模型^[17, 18]。这些物理模型使得用户能够精确地模拟无粘流、层流、湍流、化学反应、多相流等复杂的流动现象^[19]。

FLUENT 提供了灵活的网格特性。采用 Gambit 的专用前处理软件,使网格可以有多种形状。对二维流动,可以生成三角形和矩形网格;对三维流动,则可生成四面体、六面体、三角柱和金字塔等网格;还可生成混合网格;其自适应功能,能对网格进行细分或粗化,或生成不连续网格、可变网格和滑动网格。用户可方便的使用结构网格和非结构网格对各种复杂区域进行网格划分^[20]。

FLUENT 软件的求解模块是其核心部分,该模块的数学模型是以纳维斯托克斯方程组与各种湍流模型为主体,在加上多相流模型、燃烧与化学反应流模型、自由面模型以及非牛顿流体模型等。大多数附加的模型是在主体方程组上补充一些附加源项、附加输运方程与关系式。采用有限体积法离散方程,其计算精度和稳定性都很好^[21]。

FLUENT 具有强大的后处理功能,能够完成 CFD 计算的基本要求,包括速度矢量图、等值线图、等值面图、流动轨迹图,并具有积分功能,可以求得力、力矩及其对应的力和力矩系数、流量等。对于用户关心的参数和计算的误差可以随时进行动态跟踪显示。

大部分情况下,所测对象的变化趋势能够准确地预测出来,但是具体量的大小还存在着一定的误差,可依靠实验手段来修正。FLUENT 的作用主要体现在缩短设计过程,减少实验室测定试验的数目,减少产品开发成本,也即为 CFD 的作用所在^[22]。

利用 FLUENT 软件的求解步骤为:(1)建立模型及划分网格;(2)选择解算器(二维或三维、单精度或双精度);(3)导入网格检查网格;(4)选择解算器公式(分离解算器或耦合解算器);(5)选择所需要解决的基本方程(控制方程);(6)说明物质性质(密度、粘度等);(7)说明边界条件;(8)调整解的控制参数;(9)起始化流场;(10)计算出结果;(11)检查结果;(12)保存结果;(13)改进模型及解法。

1.3 本文的研究工作

本文的具体工作如下：

(1) 对近年来建筑小区污染物扩散在国内外的的发展状况作了进一步的回顾与评价,对在空气质量模型中引入微生物污染源的国内外发展状况、可行性及重要性作了进一步的回顾和评价,对CFD应用软件FLUENT作了简要的介绍。

(2) 论述了三种湍流数值模型的基本情况及其应用,概述了CFD技术中网格技术的原理及应用,对病毒群体动力学方程做了进一步的研究和论述。

(3) 以二维街道峡谷模型作为数值模拟的基本对象,根据前人的风洞实验数据研究了模型的计算域确定、边界条件选取问题,验证了模型的准确性,比较了三种不同湍流模型的优缺点并进行了选取,比较了结构网格和非结构网格的优缺点并进行了选取。

(4) 以二维水平方向的建筑群为数值模拟的基本对象,研究了稳态点源污染物在单建筑、三种结构多建筑小区间的扩散情况,得出一些有用结论,为设计有利于污染物扩散的小区结构提供了依据。

(5) 将以上二维模型中的多建筑小区在三维情况下实现,验证二维所得规律的准确性,同时验证了二维计算的可行性。

(6) 以二维水平方向的建筑群为数值模拟的基本对象,研究了稳态线源污染物对九建筑小区在不同位置时的影响,并考虑了气象因素之一风向的影响,得出了一些有用规律,为设计有利于污染物扩散的小区结构提供了依据。

(7) 得出了一种优化方法:在研究所得规律之前,可先在二维情况下试算,找到适用的条件及一些规律,然后再在三维情况下验证,可节省大量的研究时间。

(8) 将病毒感染群体动力学方程组引入模型中作为污染源,进行了一种动力学方程组参数反求的尝试,并在这过程中应用图像识别功能为之服务。观察了非稳态污染物在建筑小区中的扩散现象,得出一些有用结论,为建立有害微生物扩散预警模型及小区结构的抗污染扩散设计提供了模型。

第二章 理论简介

2.1 大气环境质量模型

在讨论大气污染物扩散过程前，首先要了解大气边界层流动和污染扩散特征，如大气的垂直分层、边界层大气的运动特征、污染物扩散过程等^[23]，这些都是大气环境质量模型的理论基础。

2.1.1 大气边界层

1、大气边界层简介

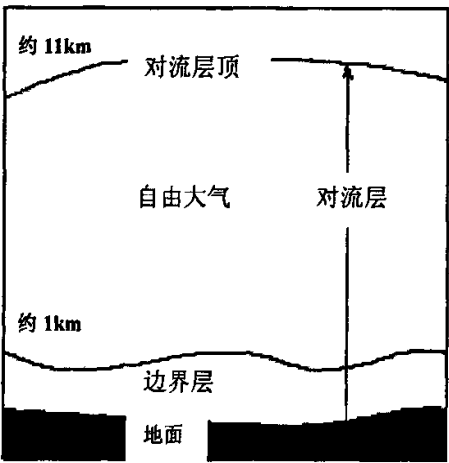


图 2-1 大气边界层与自由大气

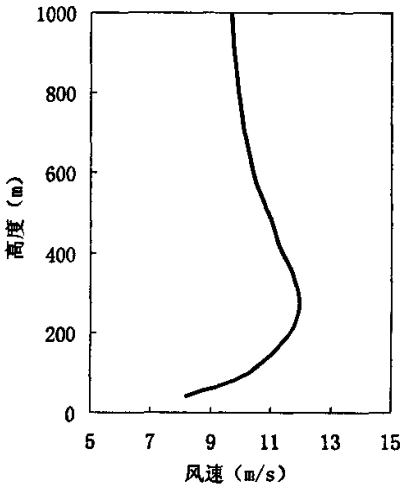


图 2-2 稳定边界层垂直速度分布
(来自某实验观测资料^[24])

大气科学中，通常把受到下垫面影响最剧烈的一层称为大气边界层，也就是大气最靠近地面的一层，如图 2-1 所示。大气边界层的厚度在 1-2km 之间，随不同地点、不同时间，边界层厚度会发生变化。

大气边界层又分为近地层和 Ekman 层，都以湍流运动作为主要特征，但又存在动力学上的差别。近地层大约是整个边界层厚度的 1/10，受到地面强烈的影响。在这层中雷诺应力是最主要的力，并且其大小几乎不随高度变化，因此也被称为常值通量层。建筑物通常都在这一层中，我们的数值模拟区域也在这一层。

在大气边界层中,由于摩擦力随高度增加而减小,当气压梯度力不随高度变化时,风速将随高度增加而增大。我们把平均风速随高度的变化曲线称为风速廓线,将风速廓线的数学表达式称为大气边界层平均速度模型。通过风速廓线可以从测量的地面风速推算出大气边界层内任意高度处的风速(如图 2-2)。

大气边界层的研究依赖于观测结果,常见的观测量主要有风速、气温、湿度等,它们在边界层内的分布特征能从宏观的角度描述边界层内的物理结构。

2、大气边界层平均速度模型

大气边界层的平均速度剖面一般用如下指数定律或对数定律描述。风洞实验一般用指数定律,而数值模拟则看情况决定。

$$\frac{u(z)}{u(\delta)} = \left(\frac{z-d_0}{\delta-d_0} \right)^\alpha \quad (2-1)$$

$$u(z) = \frac{u^*}{k} \ln \left(\frac{z-d_0}{z_0-d_0} \right) \quad (2-2)$$

其中,公式(2-1)的 $u(z)$ 和 $u(\delta)$ 分别表示高度在 z 和边界层高度 δ 时的平均速度, α 为垂直风剖面指数(通过实际测量确定)。公式(2-2)中 u^* 是摩擦速度, κ 为卡门常数(通常取为0.4), d_0 是排挤厚度, z_0 是表面粗糙度。

2.1.2 污染物扩散模型

1、污染物扩散模型

大气环境质量模型中,污染物质的扩散预测模型依据不同的地理条件、气象条件、污染源状况、预测的时间尺度与空间范围分成不同的预测模型。按照污染物扩散的状态分烟流模型、烟团模型和箱式模型。按照推导方法分演绎法导出的物理模型和归纳法得出的统计模型;按照污染源特点可分为点源、线源、面源扩散模型;根据不同的气象条件,有封闭型、熏烟型、微风下的扩散模式;根据不同的下垫面地理特点,有城市扩散模式、山区扩散模式和水域附近的扩散模式等;按照预测的时间尺度,有短期浓度预测模式和长期平均浓度计算模式。

大气环境质量模型中,污染物的三维扩散公式^[25, 26]为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{i,x} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{i,y} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{i,z} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - u_z \frac{\partial C}{\partial z} - \gamma C \quad (2-3)$$

其中 $D_{i,x}$ 、 $D_{i,y}$ 、 $D_{i,z}$ 为三个方向上的湍流扩散系数, u_x 、 u_y 、 u_z 为三个方向上的风速, γ 为污染物自身的衰减系数, $\partial C / \partial t$ 为污染物的浓度随时间的变化。

由于此式解析解要求的条件是非常严格的,复杂的环境条件通常很难满足这些要求,一般采用数值方法求解。环境质量基本模型的数值方法主要有有限差分法和有限单元法^[27, 28]。

不考虑污染物自身的衰减,公式(2-3)可改写为:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(D_i + \frac{\mu_i}{Sc_i} \right) \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right] \quad (2-4)$$

这是本文使用的污染物扩散方程,其中 C_i 是污染物的浓度, D_i 是扩散系数, Sc_i 是湍动 Schmidt 数($Sc_i = 0.7$),为了方便,将污染物的湍流扩散系数记为 $D = D_i + \mu_i / Sc_i$ 。

2、大气湍流对污染物扩散迁移的影响

污染物在大气中的扩散取决于3个因素^[29]。风可使污染物向下风向扩散,湍动可使污染物向各方向扩散,浓度梯度可使污染物发生质量扩散。其中风和湍流起主导作用。

风使污染物发生推流迁移,风速越快,迁移距离越远。如果大气层中没有湍流,那么污染物排入大气后,它向四周的扩散过程是非常缓慢的。因为此时只有较小的分子扩散起作用。实际大气中,由于湍流的存在,且湍流扩散系数比分子扩散系数大 10^5 - 10^6 倍,导致污染物扩散非常迅速。因此,在实际大气研究中,常忽略分子扩散的作用。

大气总是处在湍流运动中,并且湍流运动的旋涡尺度可从几百米到几毫米,因而大气中的污染物不可避免地被各种尺度的湍涡夹带和输送。由于湍涡运动是无规则的,其速度大小、方向是随机的,因而污染物在随平均风向下风向输送过程中,还不断地向不同方向扩散、稀释,使污染物流的形状时刻发生变化,且输送距离越长,扩散范围也越广。

2.1.3 环境风洞模拟实验

风洞实验是研究城市建设规划与气象环境和大气污染关系时常用的实验手段。目前,通常将其与数值模拟和现场观测配合使用。

风洞实验不受天气条件限制,实验条件(方案)可控,并具有周期短及可直接观察的特点。通过实验测量,获取研究对象定量和定性的结果。对结果进行分析,可了解研究污染扩散分布。

风洞大气边界层实验时,在实验段入口处依次布设挡墙、尖塔湍涡发生器^[30]、不同尺寸的方块粗糙元等,以求在下游一定距离形成一定厚度的模拟边界层,模

型区设在这个稳定边界层中，该区的垂直风速剖面与原型吻合，使其符合模拟运动的相似要求。

Murakami 等的风洞实验得出的大气边界如图 2-3 所示：

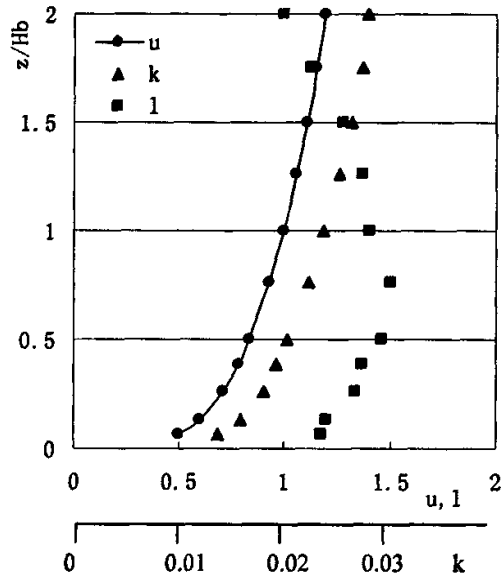


图 2-3 风洞实验所测的无量纲量

其中 u 是风洞实验的速度剖面曲线， k 是湍动能随高度的变化曲线， l 是湍流尺度随高度的变化曲线，均为无量纲形式。

2.1.4 钝体绕流简介

流体流过钝体（流场中的物体）时，由于粘性的存在，将导致绕流流场中出现旋转、分离、再附以及尾迹区的非定常涡脱落等复杂现象，被称为钝体绕流。

当雷诺数很小时，绕流时表现为附体流动；当雷诺数增大时，钝体的背风面将出现对称的脱体旋涡；随着雷诺数的进一步增大，背风面的旋涡将由对称变为非对称；当雷诺数达到某一范围时，将在背风面上出现卡门涡街（两列涡旋，两两相隔、旋转方向相反，涡旋间距离不变，两排涡列间距只和物体的线尺度有关）。

钝体绕流由于有以上复杂特性而成为人们研究的热点问题，有关各种形状的钝体绕流的数值模拟及实验都在不断的研究之中。在本文的数值模拟中，由于雷诺数足够大，也出现了卡门涡街现象，导致污染物扩散的波动性。

2.2 湍流流动及其数学模型

层流和湍流是两种基本的流动状态，存在着临界雷诺数，当流动的雷诺数超

过相应的临界雷诺数时,就会诱发湍流,湍流流动是自然界常见的流动现象,在多数工程问题中流体的流动往往处于湍流状态,因此,湍流研究一直被研究者高度重视。在空间建筑物的研究中,由于建筑物下垫面的复杂,本课题采用湍流模型对建筑小区周围的污染物扩散场进行数值模拟。

由于湍流本身的复杂性;直到现在仍有一些基本问题尚未解决。本章不深入涉及湍流的结构及发生的机理,主要从数值模拟的实际应用角度介绍不可压流体湍流流动常用数值模拟方法。

2.2.1 湍流简介

当 Reynolds 数小于某一临界值时,流动是平滑的,相邻的流体层彼此有序地流动,这种流动称作层流。当 Reynolds 数大于临界值时,会出现一系列复杂的变化,最终导致流动特征的本质变化流动呈无序的混乱状态,这时,即使是边界条件保持不变,流动也是不稳定的,速度等流动特性都随机变化,这种状态称为湍流。图 2-4 是在湍流状态下在某一点测得的速度随时间的变化情况。可以看出,速度值的脉动性很强。湍流中的脉动现象对工程设计有直接影响,压力的脉动增大了建筑物上承受的风载的瞬时载荷,有可能引起建筑物的有害振动^[31]。

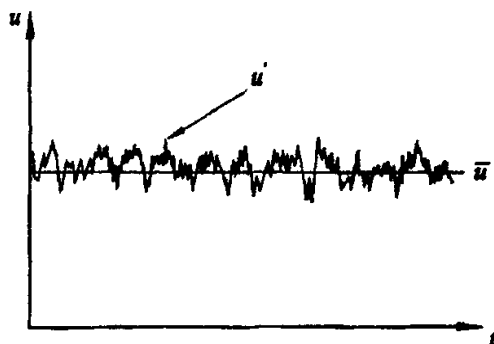


图 2-4 湍流某特定点的实测速度

湍流的产生可能是由于固壁的摩擦作用,也可能由于不同速度的流体层之间的相互作用,这两种方式产生的湍流性质有所不同。通常前者称为固壁湍流,后者称为自由湍流。另外,湍流分为均匀湍流、非均匀湍流。本研究为了简化,我们假定湍流为均匀湍流^[12]。

物理上,可以把湍流看成是内各种不同尺度的涡叠合而成的流动。这些涡的大小及旋转轴的方向分布是随机的。大尺度的涡主要由流动的边界条件所决定,其尺寸可以与流场的大小相比拟,主要受惯性影响而存在,是引起低频脉动的原因;小尺度的涡主要是由粘性力所决定,其尺寸可能只有流场尺度的千分之一的

量级,是引起高频脉动的原因。大尺度的涡破裂后形成小尺度的涡,较小尺度的涡破裂后形成更小尺度的涡。在充分发展的湍流区域内,流体涡的尺寸可在相当宽的范围内连续变化。大尺度的涡不断地从主流获得能量,通过涡间的相互作用,能量逐渐向小尺寸的涡传递。最后由于流体粘性的作用,小尺度的涡不断消失,机械能就转化(或称耗散)为流体的热能。同时由于边界的作用、扰动及速度梯度的作用,新的涡旋又不断产生,这就构成了湍流运动。流体内不同尺度的涡的随机运动造成了湍流的一个重要特点——物理量的脉动^[32]。

由于湍流的复杂性,目前还无法对其给出一个严格的定义。一般认为湍流有以下几个特征:(1)湍流的流体质点的运动类似于分子运动,具有完全不规则的瞬息变化的运动特征。(2)湍流的运动参数虽是随机量,但在一定程度上符合统计规律,具有某种规律的平均特征。(3)湍流流场任意两个相邻空间点上的运动参数有某种程度的关联,加速度关联,速度与压强的关联等。边界条件不同的湍流具有不同的关联特征。

2.2.2 湍流的数学模型

本文研究的空气属于粘性不可压缩流体,基本方程组为^[32]:

连续性方程:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2-5)$$

动量方程:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + g_i \quad (2-6)$$

式中, u 是速度, x 代表方向, ρ 是流体密度, t 代表时间, μ 是粘性系数, g_i 是重力加速度。该基本方程组是湍流模型的基础。

目前,湍流数值模拟方法可以分为直接数值模拟方法和非直接数值模拟方法。图 2-5 是湍流数值模拟方法的分类图。

直接数值模拟(DNS)方法是指直接求解瞬时湍流控制方程(2-5)和(2-6)。其最大好处是无需对湍流流动做任何简化或近似,理论上可以得到相对准确的计算结果。但是,由于湍流的高频湍动,只有在很微小的空间和时间步长下,才能分辨出湍流场中详细的空间结构和时间特性。目前的计算机的能力还远不能达到要求,无法用于真正意义上的工程计算^[33]。

非直接数值模拟方法就是不直接计算湍流的脉动特性,而是设法对湍流作某种程度的近似和简化处理。其中 LES 方法是目前 CFD 研究和应用的热点之一,

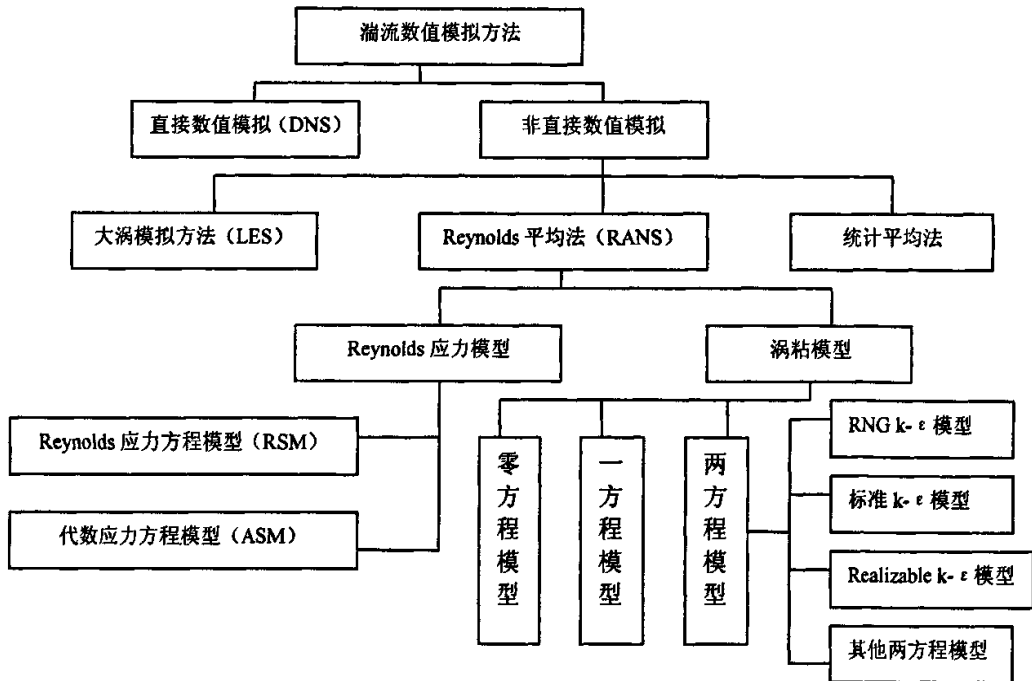


图 2-5 湍流数值模拟方法及相应的湍流模型

其一方面要求计算区域的尺寸应大到足以包含湍流运动中出现的最大涡，另一方面要求计算网格的尺度应小到足以分辨最小涡的运动，所以对这种方法对计算机要求仍比较高。目前只能放弃对全尺度范围上涡的运动模拟，将比网格尺寸大的湍流运动直接计算，而小尺度的涡则建立湍流模型来模拟。即使这样，它的耗时性还是最大的工程应用障碍。

Reynolds 平均法 (RANS) 是求解湍流问题广泛采用的一种方法。它不直接求解瞬时的 Navier-Stokes 方程，而是想办法解时均化的 Reynolds 方程。从而避免了 DNS 方法的计算量大的问题。在工程实际应用取得了很好的效果，是目前使用最为广泛的湍流数值模拟方法。

按雷诺应力的封闭方法，又分为雷诺应力模型和涡粘模型。涡粘模型中不可压缩粘性流体所用的控制方程组如下：

连续性方程：

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2-7)$$

动量方程：

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u'_i u'_j}) + \rho g_i \quad (2-8)$$

涡粘模型不直接处理雷诺应力项,而是把湍流雷诺应力表示成湍动粘度的函数,整个计算的关键在于确定这种湍动粘度。湍动粘度的提出来源于 Boussinesq 提出的涡粘假定,该假定建立了雷诺应力与平均速度梯度的关系,即:

$$-\overline{\rho u_i u_j} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \quad (2-9)$$

这里, μ_t 为湍动粘度, u_i 为时均速度, δ_{ij} 是“Kronecker delta”符号(当 $i = j$ 时, $\delta_{ij} = 1$; 当 $i \neq j$ 时, $\delta_{ij} = 0$), k 为湍动能(turbulent kinetic energy):

$$k = \frac{\overline{u_i u_i}}{2} = \frac{1}{2} (\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2}).$$

湍动粘度 μ_t 是空间坐标的函数,取决于流动状态,而不是物性参数。引入 Boussinesq 假定后,湍流流动计算的关键就在于如何确定 μ_t 。依据确定 μ_t 的微分方程数目的多少,湍流涡粘模型包括:零方程模型、一方程模型和两方程模型。

两方程模型在目前工程中使用的最为广泛,最基本的是 $k-\varepsilon$ 湍流模型。本研究主要应用这个模型,下面将做重点介绍。

1、零方程模型

零方程模型是指不需要用偏微分方程而是用代数关系式把湍流粘性系数与时均值联系起来的模型。零方程模型只用湍流平均运动方程和连续方程组,并把方程组中的雷诺应力假设为平均物理量的某种代数函数,使方程组得以封闭。

零方程模型方案中最著名的是 Prandtl 提出的混合长度模型(mixing length model)。假定湍动粘度 μ_t 正比于时均速度 u_i 的梯度和混合长度 l_m 的乘积(详细信息见文献^[34])。该理论的优点是直观简单,对于如射流、混合层、扰动和边界层等有薄的剪切层的流动比较有效,但不能用于复杂流动,如带有分离及回流的流动,因此在实际工程中很少使用。

2、一方程模型

一方程模型是建立的一个湍动能 k 的输运方程来确定湍动粘性系数 μ_t , 并将 μ_t 表示成 k 的函数的模型,这样可以弥补混合长度假定的部分局限性,使湍流方程组封闭。湍动能 k 的输运方程可写为(详见^[35]):

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - c_D \rho \frac{k^{3/2}}{l} \quad (2-10)$$

方程中从左至右各项依次为瞬态项、对流项、扩散项、产生项、耗散项。湍

流的一方程模型考虑了湍动能 k 的影响, 在理论上比零方程模型前进了一步, 但在工程实际中, 其长度尺度 l 的确定仍不易解决, 从而降低了一方程模型的精度, 限制了其推广应用。

3、 $k-\varepsilon$ 两方程模型

在工程湍流计算中, $k-\varepsilon$ 的两方程模型应用最广, 本文以 $k-\varepsilon$ 两方程模型为主。

$k-\varepsilon$ 两方程模型中的 k 指单位质量流量的湍流脉动动能, ε 指脉动动能的耗散率 ($\varepsilon = \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)^{[36]}$), 湍流粘性系数 μ_t 表示为:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2-11)$$

在引入一些假设后, 由 $N-S$ 方程推得 k 和 ε 方程^[13]:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \rho \varepsilon \quad (2-12)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{c_1 \varepsilon}{k} \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - c_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2-13)$$

k 方程、 ε 方程与动量方程、连续方程一起构成了大气流动低速流动的基本控制方程。

(1) 标准 $k-\varepsilon$ 模型方程

标准 $k-\varepsilon$ 模型是由 Launder 和 Spalding 于 1972 年提出的, 该模型如下, 标准 $k-\varepsilon$ 模型中, k 和 ε 的输运方程为:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \frac{\partial k u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \varepsilon \quad (2-14)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \frac{\partial \varepsilon u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} G_k \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2-15)$$

在此, G_k 是湍动能的产生项, σ_k 和 σ_ε 分别是 k 和 ε 对应的 Prandtl 数, $C_{\varepsilon 1}$ $C_{\varepsilon 2}$ 是经验常数, 取值可参考表 2-1。

标准 $k-\varepsilon$ 模型的适用性, 有如下几点需要引起注意:

①模型系数主要是根据一些特殊条件下的实验结果确定的, 在讨论不同的问题时, 这些值可能有出入。但总体来讲, 本文所给出的模型参数值是公认的参考值。

②上述标准 $k-\varepsilon$ 模型, 是针对充分发展湍流建立的, 是一种针对高 Re 数的湍流计算模型。当 Re 数较低时, 例如, 在近壁区内的流动, 湍流发展并不充分, 湍流的脉动影响可能不如分子粘性的影响大, 在更贴近壁面的底层内, 流动可能处于层流状态。因此, 对雷诺数较低的流动使用标准 $k-\varepsilon$ 模型进行计算, 就会出现问題。这时, 必须采用特殊的处理方式, 以解决近壁区内的流动及低雷诺数时流动计算问题。常用的解决方法有两种: 一种是采用壁面函数法, 另一种是采用低 Re 数的 $k-\varepsilon$ 模型 (详见文献[12])。

③标准 $k-\varepsilon$ 模型比零方程模型和一方程模型有了很大改进, 在科学研究及工程实际中得到了最为广泛的检验和成功应用, 但在用于强旋流、弯曲壁面流动或弯曲流线流动时, 会产生一定的失真。原因是在标准 $k-\varepsilon$ 模型中, 对于雷诺应力的各个分量, 假定粘度系数 μ_t 是相同的, 即假定 μ_t 是各向同性的标量。而在弯曲流线的情况下, 湍流是各向异性的, μ_t 应该是各向异性的张量。为了弥补标准 $k-\varepsilon$ 模型的缺陷, 许多研究者对标准 $k-\varepsilon$ 模型进行了修正, 下面介绍的 RNG $k-\varepsilon$ 模型和 Realizable $k-\varepsilon$ 模型就是两种修正模型。

(2) RNG $k-\varepsilon$ 模型

RNG $k-\varepsilon$ 模型是由 Yakhot 及 Orzag 提出的。在 RNG $k-\varepsilon$ 模型中, 通过在大尺度运动和修正后的粘度项体现小尺度的影响, 而使这些小尺度运动有系统地 从控制方程中去除。RNG $k-\varepsilon$ 模型所得到的 k 方程和 ε 方程^[37], 与标准 $k-\varepsilon$ 模型非常相似:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \frac{\partial k u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \varepsilon \quad (2-16)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \frac{\partial \varepsilon u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} G_k \frac{\varepsilon}{k} - \rho \left[C_{\varepsilon 2} + \frac{C_\mu \rho \eta^3 (1 - \eta / \eta_0)}{1 + \beta \eta^3} \right] \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2-17)$$

其中: μ_{eff} 是有效湍流黏度, $\eta = Sk / \varepsilon$, S 是形变张量, 系数 η_0 和 β 的值为 4.38 和 0.012, 其它参数取值可参考表 2-1。

与标准 $k-\varepsilon$ 模型比较发现, RNG $k-\varepsilon$ 模型主要变化是:

①通过修正湍动粘度, 考虑了平均流动中的旋转及旋流流动情况;

②在 ε 方程中增加了一项, 反映了主流的时均应变率, 这样, RNG $k-\varepsilon$ 模型中产生项不仅与流动情况有关, 而且也是空间坐标的函数。RNG $k-\varepsilon$ 模型可以更好地处理高应变率及流线弯曲程度较大的流动。

(3) Realizable $k-\varepsilon$ 模型

标准 $k-\varepsilon$ 模型对时均应变率特别大的情形, 有可能导致负的正应力。为使流动符合湍流的物理定律, 需要对正应力进行某种数学约束。为保证这种约束的

实现,文献^[38]认为湍动粘度计算式中系数 C_μ 不应是常数,而应与应变率相联系。

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \frac{\partial k u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \varepsilon \quad (2-18)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \frac{\partial \varepsilon u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S \varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} \quad (2-19)$$

这里

$$C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right] \quad (2-20)$$

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_1 U^* k / \varepsilon} \quad (2-21)$$

A_0 为常数, A_1 为曲率影响, U^* 为旋度影响。

与标准 $k-\varepsilon$ 模型比较发现, Realizable $k-\varepsilon$ 模型主要变化是:

①湍动粘度计算公式发生了变化, 引入了与旋转和曲率有关的内容。

② ε 方程发生了很大变化, 方程中的产生项(公式 2-26 右端第二项)不再包含有 k 方程中的产生项 G_k 。

③ ε 方程中倒数第一项不具有任何奇异性, 即使 k 值很小或为零, 分母也不会为零。这与标准 $k-\varepsilon$ 模型和 RNG $k-\varepsilon$ 有很大区别。

Realizable $k-\varepsilon$ 模型已被有效地用于各种不同类型的流动模拟, 包括旋转均匀剪切流、包含有射流和混合流的自由流动、管道内流动、边界层流动, 以及带有分离的流动等。

表 2-1 湍流 $k-\varepsilon$ 模型中各项参数的取值

$k-\varepsilon$ turbulence model	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_μ	σ_k	σ_ε
Standard	1.44	1.92	0.09	1.0	1.3
RNG	1.42	1.68	0.0845	Analytical formula	Analytical formula
Realizable	-	1.9	Analytical formula	1.0	1.2

4、其它湍流模型

前面介绍的各类湍流模型所采用的控制方程都是对流场中的一个点建立起来的, 可以统称为“单点模型”。为了掌握不同尺寸涡旋的统计特性, 考虑雷诺应力各个分量的不同发展, 常需要空间两点物理量关系的一些信息。由适用于单点的 N-S 方程出发可以导出空间两点间速度分量乘积的时均偏微分方程, 在这基础

上建立起一套数值计算方法,这类方法则称为“两点模型”。如雷诺应力输运方程模型(RSM)和代数应力模型(ASM)。

(1) 雷诺应力输运方程模型(RSM)

为了反映 Reynolds 应力在各个不同方向之间的输运关系,许多科学工作者放弃了 Boussinesq 涡粘性假设,设法建立了关于 Reynolds 应力的微分输运关系式,并由此得出 Reynolds 应力输运方程模型(RSM)。与两方程模型相比,在理论上具有更好的通用性和精度。但这套模型要求解雷诺应力的所有分量所满足的微分方程,同时还要求解 $k-\varepsilon$ 方程,从而使需求解的模型方程数大大增加,对计算机容量和计算费用的要求也大大增加。目前, RSM 的应用还不如 $k-\varepsilon$ 模型和 RSM 的简化形式 ASM 广泛。

(2) 代数应力模型(ASM)

RSM 计算工作量太大,在实际应用中十分麻烦。为了减少偏微分方程数量,在雷诺应力方程模型的基础上,人们设法用雷诺应力的代数关系取代其微分方程,在和 $k-\varepsilon$ 方程一起构成了 ASM 模型。

与标准 $k-\varepsilon$ 模型和 RSM 模型相比, ASM 的优点是在一定程度上综合了前者的经济性和后者的通用性。在计及体积力效应(浮力、流线弯曲、旋转等)时, ASM 的优点尤为突出, ASM 也是目前计算复杂湍流比较实用的模型。

5、大涡模拟 (LES)

大涡模拟是介于直接数值模拟(DNS)与 Reynolds 平均法(RANS)之间的一种湍流数值模拟方法。随着计算机的快速提高,大涡模拟成为目前 CFD 领域的新热点^[39]。其基本思想是放弃对全尺度范围上涡的瞬时运动的模拟,将比网格尺度大的湍流运动通过瞬时 Navier-Stokes 方程直接计算出来,而小尺度涡对大尺度涡运动的影响则通过一定的模型在针对大尺度涡的瞬时 Navier-Stokes 方程中体现出来。要实现大涡模拟,须完成两个重要的环节,即建立一种数学滤波函数(从湍流瞬时运动方程中将尺度比滤波函数的尺度小的涡滤掉,从而分解出描写大涡流场的运动方程)和建立亚格子尺度模型(被滤掉的小涡对大涡运动的影响通过在大涡流场的运动方程中引入附加应力项来体现,即亚格子尺度应力,该模型为亚格子尺度模型 SGS)。

2.2.3 湍流模型的应用总结

在工程中,湍流模拟应用最广泛的模型是 $k-\varepsilon$ 模型, ASM 和 RSM。三种模型对于无分离流动,如自由剪切流和壁面剪切流都可以取得满意的效果;对于复杂流动,如流动发生分离或不规则边界, RSM 效果更好一些, ASM 一般优于 $k-\varepsilon$

模型。一般而言, RSM 在三种模型中是最精细的, 预测效果最好, 但要求解的微分方程组太多, 在工程应用中受到一定限制。ASM 的优点是比 RSM 简单得多, 而其计算结果比 RSM 差不了多少, 受到了工程界的推崇。 $k-\varepsilon$ 模型模拟结果虽不如 ASM, 但其进一步减少了计算量, 并可以提供满足工程需要的数据, 在本文研究中, 我们选取了 $k-\varepsilon$ 模型。

对于建筑群周围空气流动的数值模拟, 目前普遍应用的是 $k-\varepsilon$ 模型, 但是随着计算机能力的提高, 相信大涡模拟等对计算要求比较高的模型会越来越的被应用。

2.3 CFD 模拟的技术及理论

在模拟建筑物周围空气流场问题的第一步是生成网格, 既要空间上连续的计算区域进行剖分, 把它划分成许多个子区域, 在通过相应的算法来进行相应的计算。

研究发现流动问题结果的精度及计算的效率, 主要取决于所生成的网格的质量及所采用的算法。网格质量是由网格的生成方法决定的, 现在有多种网格生成办法, 如结构网格的贴体坐标法, 非结构网格的基于有限元方法的网格生成技术、基于 Delaunay 准则的一类网格剖分方法和波前法等, 但是各种生成网格的方法在一定的条件下都有其优越性及缺点。如前所述, 各种求解流场的算法也各有其适应范围。综合来看, 要建立一个成功高效的数值模拟, 只有当生成的网格和求解的算法达到良好的匹配时才能实现。

2.3.1 数值模拟的网格技术简介

CFD 模型的网格技术包括网格的生成、计算域的划分及对网格质量的优化。对于复杂的 CFD 问题, 网格生成极为耗时, 且极易出错。目前的 CFD 计算多是通过专用的网格生成软件来制作所需要的网格, 如 GAMBIT 等。网格分为结构网格和非结构网格两大类。

1、结构性网格

从严格意义上讲, 结构化网格是指网格区域内所有的内部点都具有相同的毗邻单元(如图2-6)。在图中可以看出, 节点排列有序, 即当给出了一个节点的编号后, 立即可以得出其相邻节点的编号。结构网格是一种传统网格形式, 网格的自身利用了几何体的规则形状。

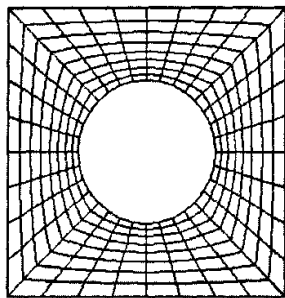


图 2-6 结构化网格实例

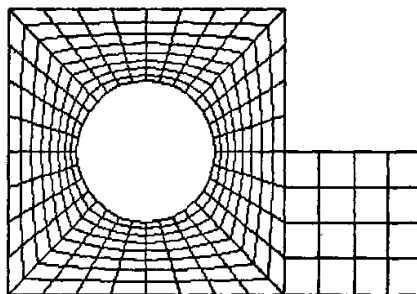


图 2-7 块结构网格实例

对于复杂的几何区域，结构网格是分块构造的，这就形成了块结构网格。图 2-7 是块结构网格的实例。

结构化网格有很多优点：易实现区域的边界拟合，适于流体和表面应力集中等方面的计算，网格生成的速度快，网格生成的质量好，数据结构简单、对曲面或空间的拟合大多数采用参数化或样条插值的方法得到，区域光滑，与实际的模型更容易接近等。

虽然结构性网格有如上优点，但是其适用的范围较窄。随着近几年的计算机和数值方法的快速发展，人们对求解区域的复杂性的要求越来越高，在这种情况下，结构化网格就显得力不从心了。

2、非结构性网格

同结构化网格的定义相对应，非结构化网格是指网格区域内的内部点不具有相同的毗邻单元（如图 2-8），即与网格剖分区域内的不同内点相连的网格数目不同。这种网格虽然生成过程比较复杂，但却有着极好的适应性，尤其对具有复杂边界的流场计算问题特别有效。

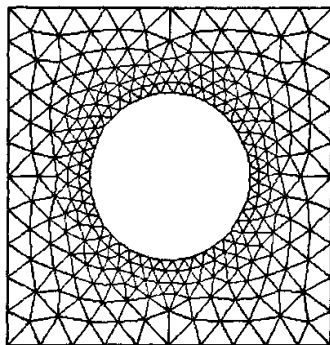


图 2-8 非结构化网格实例

非结构化网格技术从六十年代开始得到了发展,主要是弥补结构化网格不能够解决任意形状和任意连通区域的网格剖分的缺陷。但是在任意形状的几何体中直接用非结构网格进行剖分的问题仍然没有解决,现在的方法仍采用分区处理的办法,将复杂的几何区域划分为若干个简单的几何区域然后分别剖分再合成,对凹区的处理更是如此。

非结构化网格相对于结构性网格来说最大的优点是有效网格的生成比结构网格容易。非结构网格的缺点是,网格的生成速度慢,且网格数远多于结构网格,从而影响计算速度。在非结构网格和结构网格的准确性问题上,文献说法各不相同,因此,本文将通过数值模拟在后面的章节中讨论这个问题。

非结构网格的生成技术复杂,现有已有很多专门的生成程序或软件,如本文一直使用的通过前处理软件 GAMBIT 等。

3、网格单元的种类

单元是构成网格的基本元素。在结构网格中,常用的 2D 网格单元是四边形单元,3D 网格单元是六面体单元。非结构网格中,常用的 2D 网格单元是三角形单元,3D 网格单元为四面体单元和五面体单元(分为棱锥形和金字塔形)。

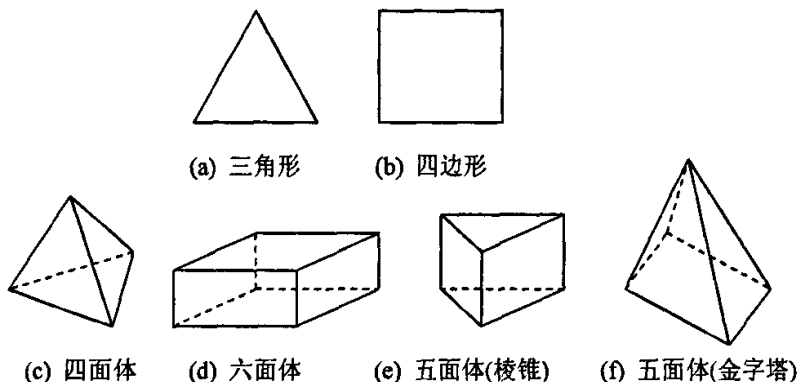


图 2-9 常用的网格单元

2.3.2 网格的划分及优化

1、网格划分应注意的问题

(1) 构建网格与网格生成时间;

(2) 计算花费:一般对于同一几何体三角形/四面体网格元素比四边形/六面体的数目要少(但是后者却能允许较大的纵横比,因此对于狭长形的几何体选

择该种网格类型)。

(3) 数字发散：引起发散的原因是由于系统格式截断误差所至。如果实际流场只有很小的发散，这时的数字发散就很重要。对于 FLUENT 来说，二次离散有助于减少发散；另外，优化网格也是降低发散的有效途径。

2、网格质量的优化

网格的分布特性，如网格的高宽比、正交性及网格的均匀性（光顺性）等，对数值模拟的结果均有影响。在二维结构化网格中，一般认为计算单元的高宽比应接近于 1。文献[40]还用算例研究了相邻两个单元之间尺度变化对计算结果误差的影响。认为只要这一尺度保持在 1.5~2.0 以内，不会对计算结果的误差产生重大的影响。而文献[41]中的建议值为 0.8~1.2。

Roache 等人还提出了对于不同疏密程度网格计算结果准确性的一种评估方法，即所谓的网格收敛指标（GCI）法。

网格的加密方法，也是网格优化的方法。实际上，合适的单元高宽比与所计算的具体问题有关。在初始设定的网格中完成一次计算后，如果高宽比不合适的话（即得不到精确解时），可以再加密网格。网格的加密方法很多，在 CFD 计算软件中，可以采用 Gambit 中的网格加密工具（Gambit 中网格加密方法工具有：Boundary layer 网格辅助工具；size function 网格工具；Grid adaption 网格工具），也可用 FLUENT 中的网格梯度自适应方法边计算边修改加密。本文采用的即 FLUENT 中的梯度自适应梯度加密方法。

3、网格数与计算时间的关系

计算 CPU 和网格数、湍流模型、离散格式阶数与算法等都有密切关系。一般而言，每十万个单元需要 100M 内存。在 CPU 速度和内存两者中，计算速度和内存的关系更大。至于具体的计算时间没有统计过，给一个参考数据：62 万网格，RNG $k-\varepsilon$ 模型，一阶精度，机子配置是 P4 1.7G，512M DDR 内存，计算 100 步要 2 个小时。

2.3.3 数值模拟计算方法的选取

FLUENT 提供的算法有三种：可以选择 SIMPLE、SIMPLEC 和 PISO。其中，PISO 算法主要用于瞬态问题的模拟，特别是希望使用大的时间步长的情况。当然，在网格高度变形的情况下，也可以选择 PISO 用于稳态计算。注意，对于 LES 模拟来说，因 LES 需要小的时间步长，因此，PISO 算法并不合适。

SIMPLE 是 FLUENT 默认的方式，但多数情况下选择 SIMPLEC 可能更合适，主

要是 SIMPLEC 的欠松弛特性可以加速收敛。该欠松弛因子一般取 1.0，但有时可能造成计算不稳定，解决办法是减小欠松弛因子或者改用 SIMPLE 算法。本文选用的是 SIMPLEC 算法就可以达到计算的稳定。

2.3.4 边界条件的处理

进流边界取大气边界层风速剖面公式 (velocity-inlet)，这一边界条件主要用于不可压缩流，如果用于可压缩流可能导致非物理结果。

出流边界采用完全发展出流边界条件 (outflow)：用于模拟在求解前流速和压力未知的出口边界，在该边界上，用户不需定义任何内容（除非模拟辐射传热、粒子的离散相及多口出流）。该边界条件适用于出口处的流动是完全发展的情况。所谓完全发展，意味着出流面上的流动情况由区域内部外推得到，且对上游流动没有影响。出流边界条件不能用于可压流动，也不能与压力进口边界条件一起使用。

两侧边界，用对称边界条件 (symmetry)：用于物理外形以及所期望的流动的解具有镜像对称特征的情况，也可用来描述粘性流动中的零滑移壁面。在对称边界上，不需要定义任何边界条件，但必须定义对称边界的位置。

建筑物边界用无滑移的壁面条件 (wall)，在粘性流动中，壁面处默认为无滑移的边界条件。

2.4 非稳态微生物污染模型

微生物在空气中的存在以气溶胶方式为主。由于微生物气溶胶具有非稳态的性质，对实际实验研究造成了较大的困难，为此本文将用数学模型对微生物气溶胶在空气中的扩散规律进行模拟。该研究将考虑到微生物的生长过程，采用群体病毒动力学模型来表示微生物生长的变化量，做为非稳态模拟中的污染源。

2.4.1 微生物气溶胶简介

微生物气溶胶是指分散相中含有微生物的气溶胶，有时又称生物气溶胶 (biological aerosol)。微生物悬浮于空气中可形成各种各样的微生物气溶胶 (microbiological aerosol)，大约 50 多万种。以微生物的种类又可分为细菌气溶胶 (bacterial aerosol)、真菌气溶胶 (fungus aerosol)、病毒气溶胶 (viral aerosol) 等。气溶胶的粒子尺寸分布很广，从 $0.001-100\mu\text{m}$ 间不等。因为微生物是个群体概念，所以形成的气溶胶粒谱范围也很宽，大约从 $0.002-30\mu\text{m}$ ，具有较大意义的生物气溶胶粒子径为 $0.1-20.0\mu\text{m}$ 。

微生物气溶胶由于种类繁多,分布广泛,浓度及粒子径的变异范围比较大等特性,因此与人类社会关系十分密切,易造成环境污染及某些传染病和疾病的暴发流行。

2.4.2 微生物生长模型

1、微生物生长动力学模型的选取

关于生物生长曲线的模型有很多,如:

Malthus 模型:假设种群数是时间的函数,并关于时间连续光滑。

$$N(t) = e^{rt} \quad (2-22)$$

Logistic 模型:在一个有限资源的环境内种群是不可能无限增长的(图 2-10)。

$$N(t) = \frac{k}{(1 + be^{-at})} \quad (2-23)$$

此外,还有 Verhulst 灰度模型,用来描述非单调的摆动发展序列和饱和的 S 行序列的状态过程,但是模拟出来的曲线^[42, 43]虽然形状上符合 S 形曲线,但由于物理意义的限制,并不适合来描述生物的生长。

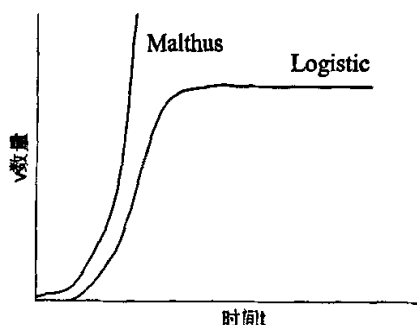


图 2-10 Malthus 模型和 Logistic 模型趋势

对于从空气中侵入宿主体内的微生物来说(病理周期短的致病性微生物),其生长过程既是在宿主体内发生感染的过程,是病原体种群在宿主生态环境中生存、进化与适应的斗争过程,病原体在宿主中生长通常会受到宿主理化屏障或捕食者和竞争者的限制和约束,不可能像 Malthus 模型一样无限制的增长,也不会像 Logistic 模型一样保持平衡,而会伴随着死亡过程慢慢减少。为此,本文选用了一种目前广泛使用的病毒感染群体动力学模型(图 2-11)即一组非线性的全微分方程组。

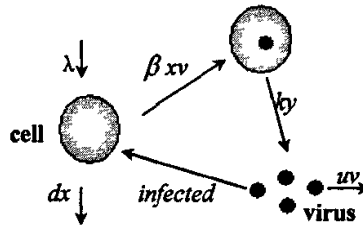


图 2-11 病毒感染群体动力学模型示意图

病毒感染群体动力学模型方程组为^[44-46]:

$$\frac{dx}{dt} = \lambda - ex - \beta vx \quad (2-24)$$

$$\frac{dy}{dt} = \beta vx - ay \quad (2-25)$$

$$\frac{dv}{dt} = ky - uv \quad (2-26)$$

其中, x , y , v 分别为宿主体内未感染细胞数、感染细胞数和游离病毒数; λ , e , β , a , k , u 均为正的常数, λ 表示未感染细胞的增长率, e 表示未感染细胞的密度制约系数, β 表示在病毒复制过程中游离病毒 v 和未感染细胞 x 的相互作用系数; a 、 u 分别为感染细胞和游离病毒的死亡率; $k = aL$, L 表示一个细胞内平均产生的病毒总数 (图 2-12)。如果时间再继续的话, 该曲线趋于平衡, 或在平衡线附近波动, 而文本为了研究它的非稳态变化过程, 所以选致平衡点即可。

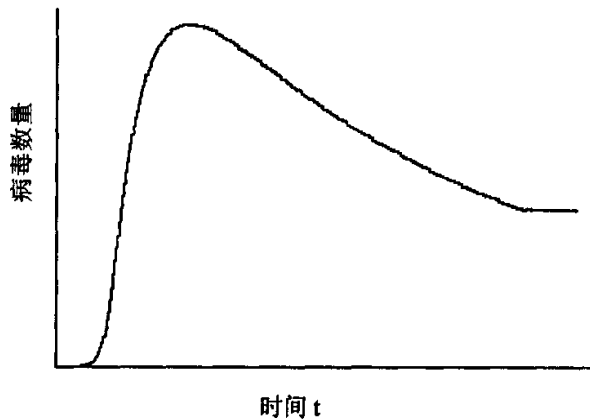


图 2-12 病毒群体动力学模型

从众多文献中看出, 病毒感染群体动力学模型能很好的符合微生物生命周期

（隐藏阶段；对数生长阶段；平衡阶段；衰退阶段）过程，有关研究染病生物体内病毒变化的生物曲线大致趋势也与之符合。所以，在众多模型中选择这种模型来模拟微生物的生长过程。

2、微生物生长模型作为污染源

一些学者将微生物作为污染源引入到空气质量模型中^[47]，但是将其微生物生长曲线与空气质量模型相结合的很少，目前只发现丹麦学家对此的研究^[12, 13, 48]，但是，其所用的微生物生长曲线只是一组实验数据，并没有与具体的生物生长模型结合起来，这是与本文研究的不同之处。本文将病毒群体动力学模型引入为非稳态污染源，带到污染物扩散方程中，研究其扩散变化规律。

第三章 污染物对建筑小区影响的模拟

本文首先在二维垂直平面上,通过目前公认的道路峡谷模型,研究了污染物对建筑小区的影响规律,并确定了数值模型的计算域、边界条件、湍流模型及网格的选取。然后设计了二维水平面模型,分别研究了点源污染及线源污染对建筑小区的影响,并与三维模型作对比,总结出了二维模型的适用性,找到了一种研究建筑小区抗污染优化设计的便捷方法。同时研究了气候因素中风向对小区中污染物扩散的作用。所有研究均为建筑小区的结构和方位的设计提供了参考。

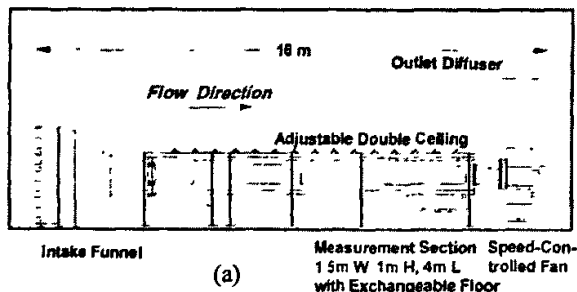
3.1 二维街道峡谷污染物扩散模型

为了提高数值模型的合理性和准确性,本文以公认的道路峡谷模型为实例,研究了数值模型建立中的计算域问题;并和以往的风洞实验及他人模拟结果相对比,分析了不同形式道路峡谷污染物扩散的规律。重点讨论了数值模拟过程中常被忽视的3个基本问题:①计算域的选取问题及入口边界处湍动能与湍动耗散率的确定;②三种流行的 $k-\epsilon$ 湍流模型计算效果的对比;③结构网格和非结构性网格的差别。

3.1.1 数值模型计算域的确定

1、风洞实验模型及他人的数值模型

本文选取道路峡谷为研究对象。通过文献可知,道路峡谷模型分为开放环境道路峡谷和城市下垫面道路峡谷。本文利用两组风洞实验来验证道路峡谷模型(开放环境下和城市环境下风洞实验模型如图 3-1 (a)、(b),具体模型条件,详见文献[49, 50])。



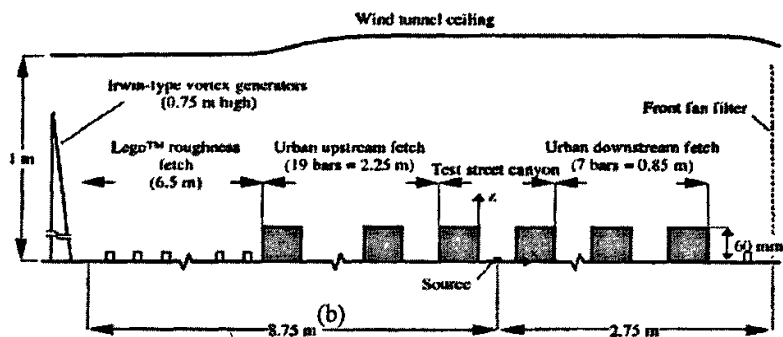


图 3-1 街道峡谷风洞实验模型 (a) 开放环境 (b) 城市环境

为了利用实验数据作验证，数值模型的街道峡谷的几何尺寸应与风洞实验一致。在保证结果准确性的基础上，还研究了计算域的选取问题，设计了较小的计算域，以节约计算时间。由于开放环境街道峡谷和城市街道峡谷模型流形的不一致性，计算域的选取也有不同。

前人研究用到的小计算域模型，如开放环境下街道峡谷模型（图 3-2 (a)），城市街道峡谷模型（图 3-2 (b)），其的研究结果在某些情况下与风洞实验存在偏差，研究发现这些偏差可能是由于计算域的选取不当造成的，本文对此进行了详细讨论。

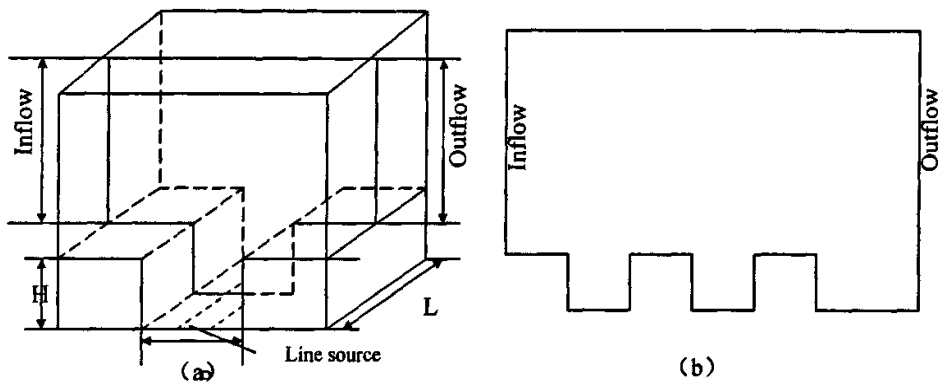


图 3-2 前人研究的街道峡谷模型 (a) 开放环境^[37] (b) 城市环境^[51]

2、本文设计的模型

由于数值模型各边界条件的可设定性，决定了模型计算域不必包括风洞实验的整个区域。本文对开放环境问题所用的计算域如图 3-3 所示，与文献 [37] 的不同之处是所有计算域边界位置需要由计算确定。为此，我们设计数值模型如下：

(1) 同风洞试验，模型为开放环境下街道峡谷模式 $B/H=1$ ，这里 B 为街道的宽， H 为建筑物的高。所用的线源的长宽比为为 $0.01\times0.0012\text{m}$ 。这里当高

度为 h_{ref} 为 0.65m 时, 速度的平均值为 u_{ref} (参考速度)。

(2) 该数值计算的边界和初始条件是: 进流边界取大气边界层风速剖面公式 $u = u^* / \kappa \ln(z/0.00025)$, 出流边界采用完全发展出流边界条件; 两侧边界, 用对称边界条件; 建筑物边界用无滑移的壁面条件。雷诺数 $Re = \rho u_{ref} H / \mu = 4100$ 。

(3) 引入恒定点源, 源强 $Q_e = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$, 为使研究结果与实验数据相一致, 选取污染物的无量纲浓度 K 为基准, 其中 L 为线源长, 本模型中取值 1。

$$K = \frac{u_{ref} C H L}{Q_e} \quad (3-1)$$

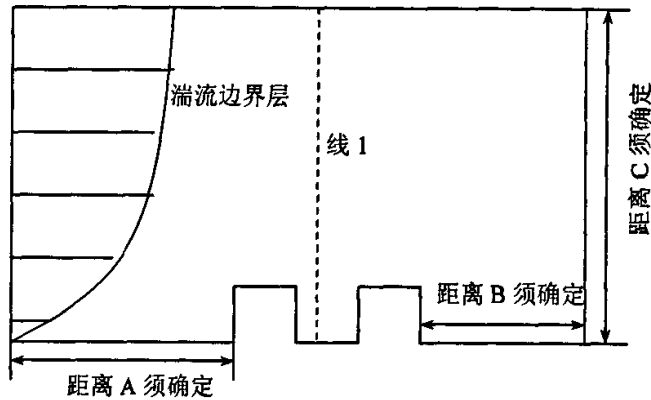


图 3-3 开放环境下单一街道峡谷的计算域

3、边界条件的确定

(1) k 、 ε 的取值

经检验看出, k 、 ε 的取值对结果是有影响的, 为此, 则必须先检验一下 k 、 ε 的影响到底有多大。对于 k 、 ε 的取值, 经验公式很多, 目前计算大气边界层较为通用的是:

$$k = 0.5(uI)^2 \quad (3-2)$$

$$\varepsilon = C_\mu^{\frac{3}{4}} k^{\frac{3}{2}} / l \quad (3-3)$$

其中, I 为湍流强度, l 为湍流尺度, 而 l 、 I 的值不易确定。决定采用上面提到的 Murakami 等的的数据 (取自图 2-3)。

将数据进行曲线拟合, 得出的公式如下:

$$I = -0.0711 \ln \left(\frac{2z}{h_{ref}} \right) + 0.231 \quad (3-4)$$

$$I = 1.1974u \left(\frac{2z}{h_{ref}} \right)^{-0.0458} \quad (3-5)$$

研究发现, 街道峡谷前面的距离不能取太长, 随着距离的增加, k 、 ε 的取值会发生相应的变化, 如图3-4所示。

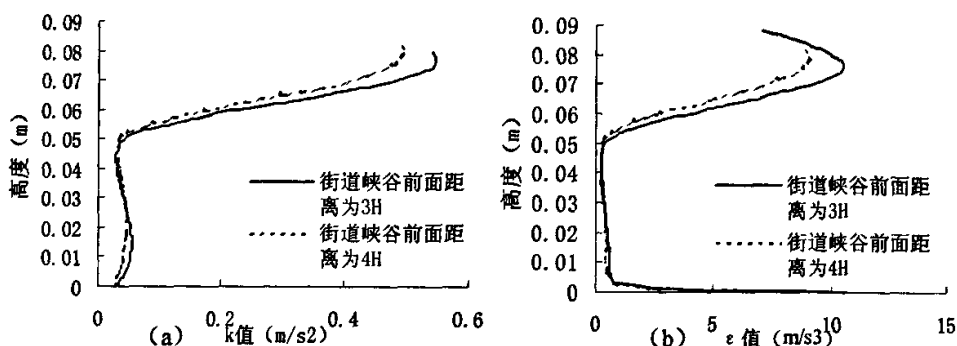


图 3-4: 开放环境街道峡谷前面距离的变化后 k 、 ε 的变化
(a) k 值变化 (b) ε 值变化

由图中可以看出, 街道峡谷内线1 (图3-3) 处的 k 、 ε 均会变小, 造成结果浓度偏高。经计算发现, 当计算域前面为 $3H$ 时, 结果最准确。其他两边由于所用的边界条件的原因, 当 $B > 3H$ 、 $C > 8H$ 时, 对污染物浓度变化无影响同理。本文所用开放环境街道峡谷模型的计算域为, $A = 3H$, $B = 3H$, $C = 8H$ 。

计算域的选取影响因素有: ①边界条件类型; ②模型结构及流体流动形式。对于所有带有大气边界层剖面的模型来说, 确定 A 的取值是最重要的。

(2) 对于城市街道峡谷来说, 用同样的方法设计模型。

经研究发现, 城市街道峡谷模型, 考虑到以上几个因素的影响, 可以用如下的最简单模式来计算, 就可达到理想的结果。这点与文献[37]不同 (文献中将该模型与风洞实验的开放环境模式作对比)。

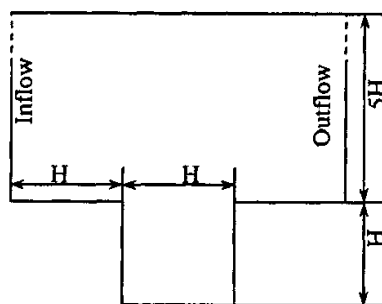


图 3-5 城市环境下单一街道峡谷计算模型

3.1.2 街道峡谷模型的模拟结果及规律分析

用设计好的街道峡谷模型进行数值模拟，并与风洞实验的结果相对比。

1、开放环境下街道峡谷数值模型的模拟结果：

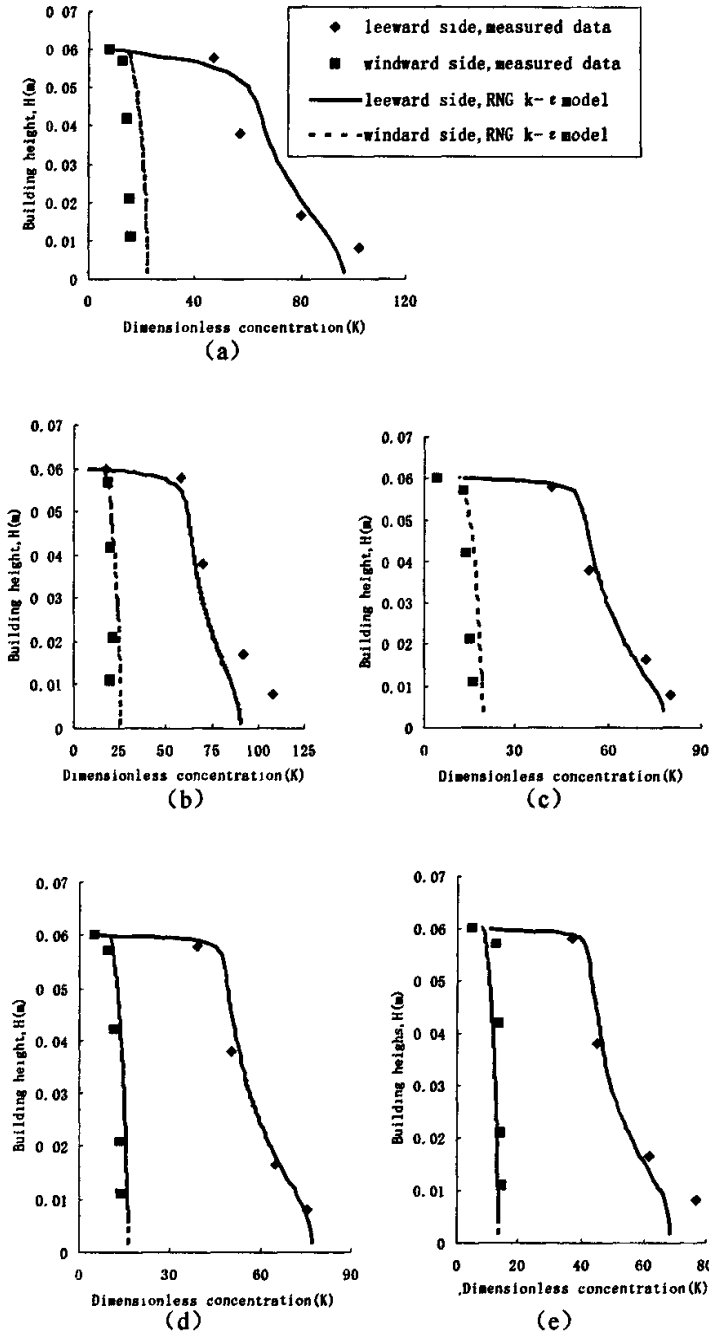


图 3-6 开放环境下背风墙和迎风墙上的污染物 K 分布，RNG 模型
(a) $U_{ref}=0.5\text{m/s}$ 时 (b) $U_{ref}=1\text{m/s}$ (c) $U_{ref}=2\text{m/s}$ (d) $U_{ref}=3\text{m/s}$ (e) $U_{ref}=4\text{m/s}$

图 3-6 给出了不同参考速度条件下, 开放环境街道峡谷的计算结果与实验数据的对比。可以看出计算结果与实验数据基本吻合, 且在风速为 2-4m/s 时吻合很好。当风速为 0.5m/s、1m/s 时, 计算结果与实验数据存在一定差别, 尤其是街道峡谷建筑背风面处的污染物浓度。产生的可能原因为: 此时流动雷诺数过小 (<2050), 湍流模型需要低雷诺数修正; 低风速下风洞实验浓度测量误差等。

2、城市环境街道数值模型的模拟结果

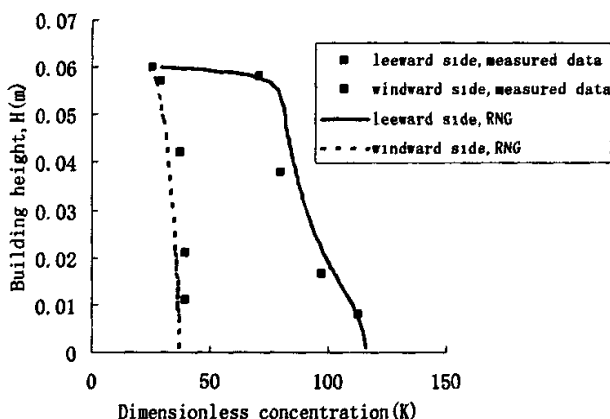


图 3-7 城市环境下背风墙和迎风墙上的污染物 K 分布, RNG 模型, $U_{ref}=2\text{m/s}$

图 3-7 给出了城市环境下背风墙和迎风墙上的污染物浓度分布。模型结果与实验吻合较好。可见在研究均匀城市下垫面时, 用本文给出的小计算域, 可以节省大量的计算时间。

比较图 3-6 (c) 和图 3-7, 可以看出当风速为 2m/s 时, 城市环境下背风墙和迎风墙上的污染物浓度大于开放环境, 这说明均一下垫面的城市街道峡谷减少了近地附近的大气流速 (分析见 3.1.3), 不利于污染物的扩散。

3.1.3 开放环境与城市环境街道峡谷的模拟分析

1、开放环境与城市环境街道峡谷污染物扩散的分析

从上面的浓度图可以看出, 街道峡谷中, 背风面上的污染物浓度要远远大于迎风面的。这是因为在街道峡谷中产生了涡旋风引起的 (图 3-9), 将街道峡谷底部的污染物吹向背风向的一侧。

2、开放环境与城市环境街道峡谷污染物扩散的区别

风洞实验揭示了污染物在两种不同的街道峡谷中的扩散情形 (图 3-8 取自文献 [49]), 从图中可以看出, 开放环境时, 污染物溢出了街道峡谷高度而跑到了

建筑物的顶部，而城市街道峡谷的污染物没有扩散出去。

本文的数值模拟的结果如图3-9所示，污染物扩散规律与风洞实验基本吻合，稍有差别处是可能是模型条件不同（风洞实验图形没有标明计算条件）所致。

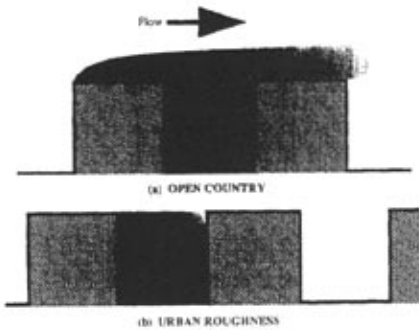


图 3-8 风洞实验得出的污染物扩散

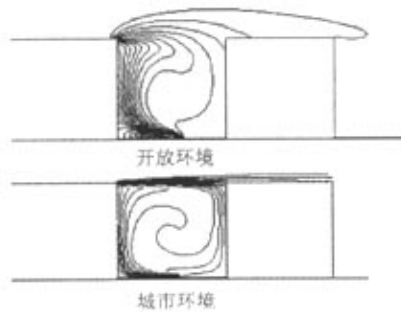


图 3-9 数值模拟得出的污染物扩散

以上污染物扩散的区别，在街道峡谷的风速场图3-10中得到了解释。

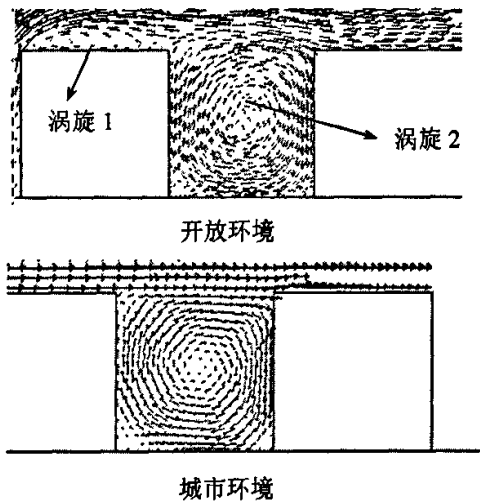


图 3-10：街道峡谷风速场

在本文计算的模型中，开放环境的街道峡谷会使来流大气边界条件发生变化，街道峡谷背风面建筑物引起了风场的变化，在街道背风侧建筑物顶，产生了风速涡旋1（同风洞实验文献^[52, 53]），同时引起街道峡谷中的风速涡旋2鼓出街道峡谷（图3-10），正是这些涡旋的存在，使得污染物能扩散到两边建筑物的顶部。

均匀下垫面的城市街道峡谷由于来流经过了很多同样的街道峡谷（如风洞实

验文献[50]中在所测的街道峡谷前面, 铺垫了17个同样的街道峡谷), 可以认为已经形成了稳定的边界层, 通过 $B/H=1$ 的街道峡谷时, 风场稳定性受建筑物的影响不大, 因此, 街道峡谷中的涡旋风集中在建筑高度范围内, 使得污染物也扩散不出去。

通过以上分析, 两种模型的湍动能分布如图3-11所示, 形状和数值都有一定的差别 (根据定义可知, 见2.2.1, 与速度值有密切的关系), 同时污染物的湍流扩散系数 D 也有很大的差别, 且开放环境的该系数数值是城市环境下该值的近10倍 (图3-12), 这也进一步说明了开放环境下污染物扩散的原因。

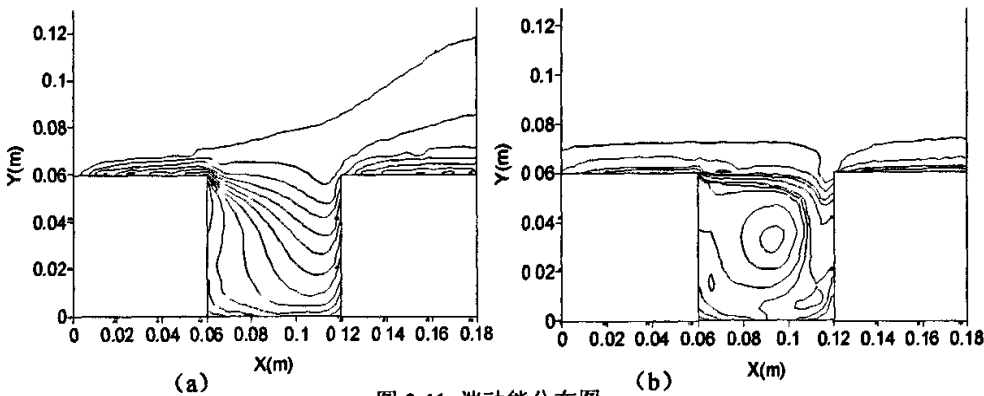


图 3-11 湍动能分布图
(a) 开放环境 (b) 城市环境

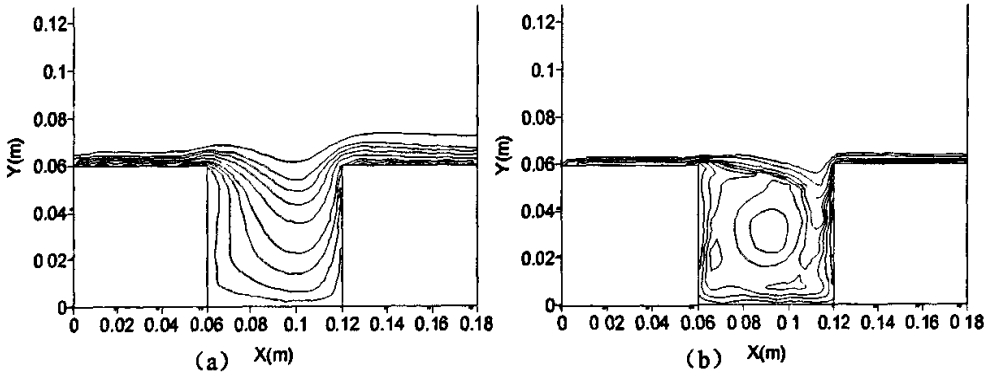


图 3-12 污染物湍流扩散系数 D_t 分布
(a) 开放环境 (6×10^{-5} - $0.01 \text{ m}^2/\text{s}$) (b) 城市环境 (6×10^{-5} - $0.001 \text{ m}^2/\text{s}$)

3.1.4 $k-\varepsilon$ 湍流模型的选取

针对目前应用较为普遍的标准 $k-\varepsilon$ 模型, RNG $k-\varepsilon$ 模型, Realizable $k-\varepsilon$ 模型, 本文应用上面的开放环境下街道峡谷模型, 结合风洞实验数据进行了对比。

1、在五种风速前提下，模拟结果如图 3-13:

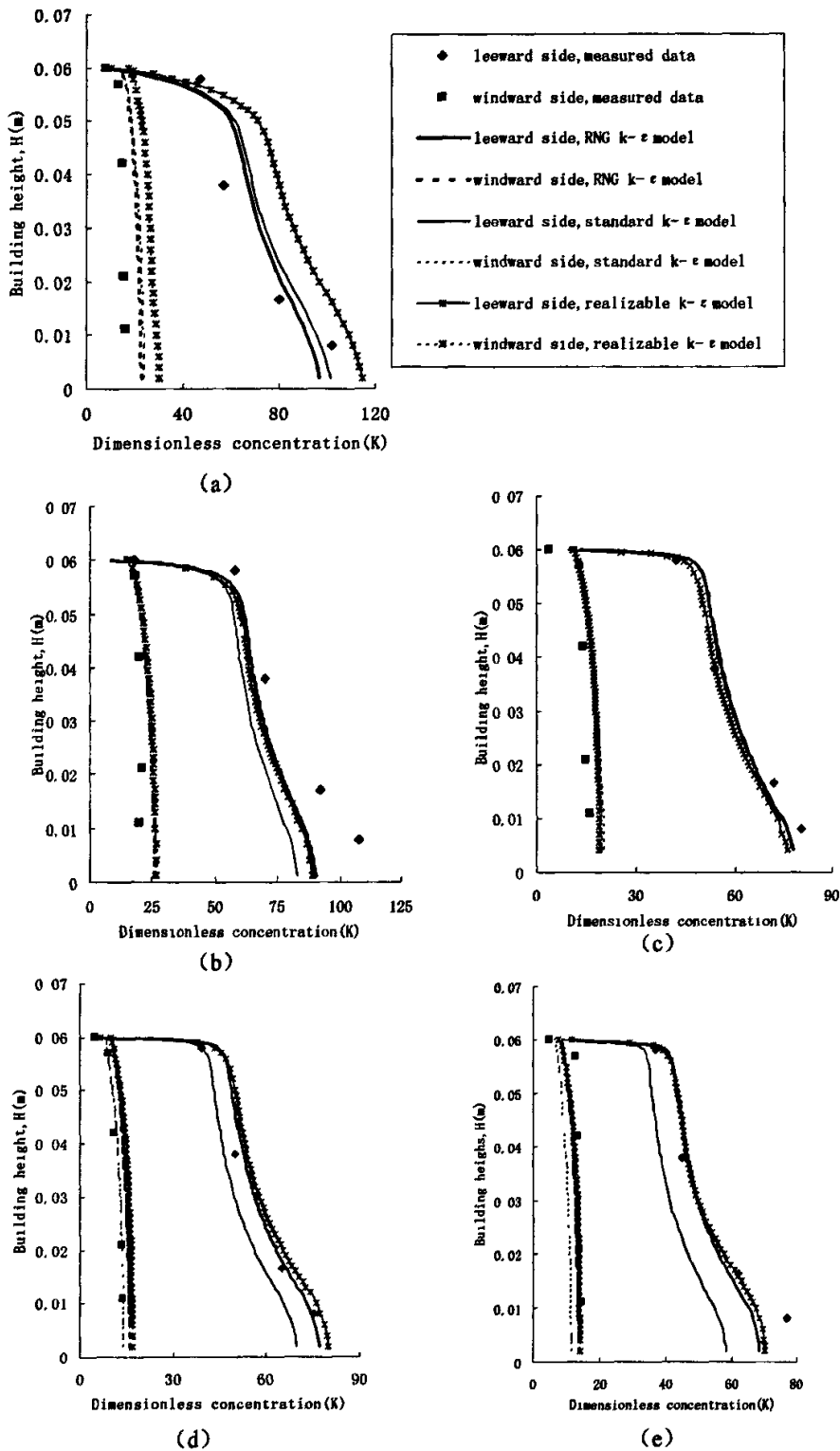


图 3-13 三种 $k-\epsilon$ 模型下的背风墙和迎风墙上的污染物无量纲浓度分布
(a) $U_{ref}=0.5\text{m/s}$ 时 (b) $U_{ref}=1\text{m/s}$ (c) $U_{ref}=2\text{m/s}$ (d) $U_{ref}=3\text{m/s}$ (e) $U_{ref}=4\text{m/s}$

2、结果分析

①在计算条件完全相同的情况下, 可以看出三种模型的预测结果差别很小, 这同 T.L.Chan^[37]的结论不同(该文献中三种模型结果差别很大, 原因可能为所用的计算模型的不同引起的)。

②对于本模型来说, 三种湍流 $k-\varepsilon$ 模型结果相差不大, 可能是由于街道峡谷模型较简单所致。但是, 在单一街道峡谷模型中, 还是能看出三种模型的一些有缺点的。

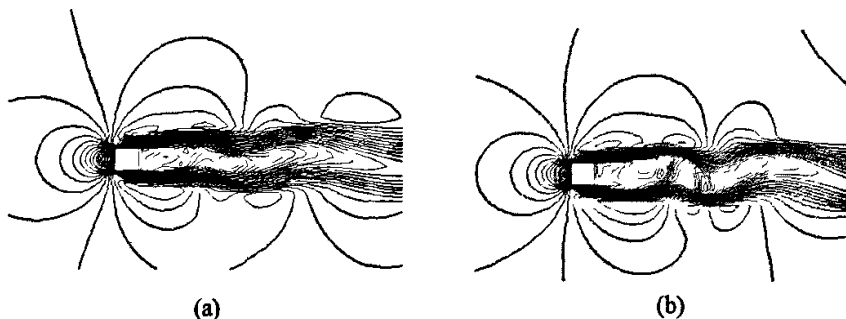
在本模型中, 标准 $k-\varepsilon$ 模型的准确性较差, 这可能是因为其在处理强旋流、弯曲壁面流动或弯曲流线流动时, 会产生一定的失真所致。Realizable $k-\varepsilon$ 模型模拟效果和 RNG $k-\varepsilon$ 模型差不多, 但是 Realizable $k-\varepsilon$ 模型不易收敛。在计算时, Realizable $k-\varepsilon$ 模型的流体湍动粘性系数比也明显高于另外两种模型, 从模型自身来看, 这可能是由于 Realizable $k-\varepsilon$ 模型在定义湍流粘度时考虑了平均旋度的影响, 在计算旋转和静态流动区域时不能提供自然的湍流粘度引起的, 为此, 不适合有这两种流动区域时的模拟。

RNG $k-\varepsilon$ 模型是在标准 $k-\varepsilon$ 模型的基础上进一步修正的, 来源于严格的统计技术。它通过修正湍动黏度, 考虑了平均流动中的旋转及旋流流动情况; 在 ε 方程中增加了一项, 从而反映了主流的时均应变率, 有效的改善了精度。标准 $k-\varepsilon$ 模型是一种高雷诺数的模型, RNG 理论则提供了一个考虑低雷诺数流动粘性的解析公式, 使得该模型能正确的对待近壁区域。这些特点使得 RNG $k-\varepsilon$ 模型比标准 $k-\varepsilon$ 模型在更广泛的流动中有更高的可信度和精度。

③综合来看, Realizable $k-\varepsilon$ 和 RNG $k-\varepsilon$ 模型比标准 $k-\varepsilon$ 模型计算效果好, RNG $k-\varepsilon$ 模型比 Realizable $k-\varepsilon$ 模型计算稳定性好。

3、二维水平方向三种模型的选取

为了在三种 $k-\varepsilon$ 模型中作选取, 又设计了二维水平模型。该流动属于钝体绕流的问题, 在真实尺度情况下, 雷诺数很大, 钝体绕流现象明显。这时, 三种湍流模型的速度场如图 3-14 所示:



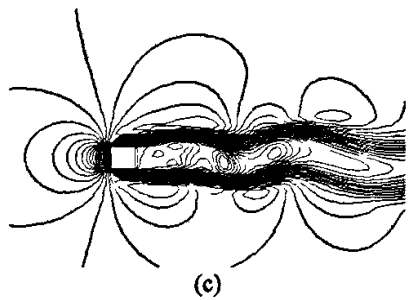


图 3-14 水平二维风速场图 ($u=5\text{m/s}$)
(a)标准 $k-\varepsilon$ 模型(b)RNG $k-\varepsilon$ 模型(c)Realizable $k-\varepsilon$ 模型

比较计算结果发现, RNG $k-\varepsilon$ 模型的速度场钝体绕流明显强于标准 $k-\varepsilon$ 模型(如图 3-14), 而 Realizable $k-\varepsilon$ 模型也表现出类似 RNG $k-\varepsilon$ 模型的湍动形式, 但是, Realizable $k-\varepsilon$ 模型在钝体绕流时, 计算结果不易控制, 常常出现发散现象, RNG $k-\varepsilon$ 模型则相对稳定。

综合来看, 无论是水平还是垂直方向, 二维情况下, RNG $k-\varepsilon$ 模型的模拟效果、稳定性是最好的。在三维情况时, 很多研究者指出 RNG $k-\varepsilon$ 模型比较适合^[54,55]。为此, 在以后的计算中, 本文均选用 RNG 模型。

3.1.5 结构网格和非结构网格的差别

将网格换为三角网格, 其他各种条件保持不变, 得出的结果如图 3-15 所示:

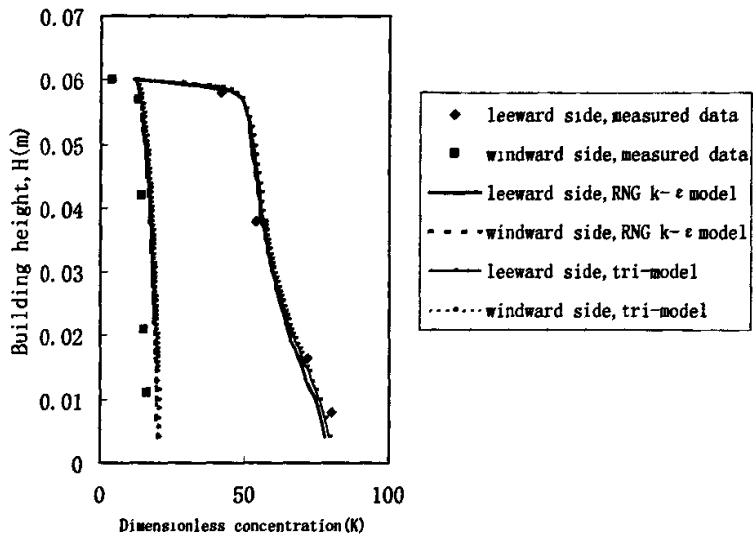


图 3-15 结构网格和非结构网格下的背风墙和迎风墙上的污染物无量纲浓度(K)分布, 开放环境下, RNG $k-\varepsilon$ 模型, $U_{\text{ref}}=2\text{m/s}$

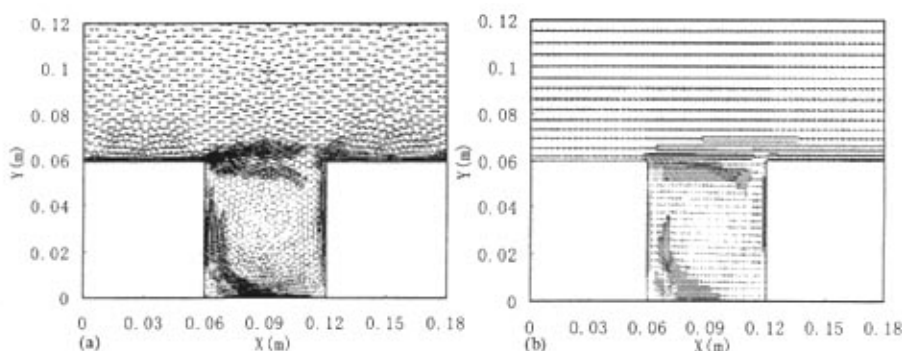


图 3-16 开放环境下加密网格显示
(a)非结构网格(b)结构网格

从图中可以看出, 结构网格与非结构网格结果都与实验符合很好。对于本文例子来说, 结构性网格迎风向墙面上污染物浓度的平均误差 4.89%、背风向 13.47%, 非结构性网格为迎风向 3.77%、背风向 14.59%, 两种网格的计算准确性不相上下(图 3-15)。

(1) 结构性网格和非结构性网格各有优点, 通过我们的建筑过程可以看出, 结构性网格相对于非结构化网格的优点有:

①网格生成速度比非结构网格快, 生成网格数量少, 计算速度较快;

②由于结构性网格曲面或空间的拟合大多数采用参数化或样条插值的方法得到, 所以区域光滑, 与实际的模型更容易接近。

(2) 在计算过程中, 非结构网格体现出来的的好处有:

①网格生成比结构网格容易。结构性网格的划分需要一定的技巧和耐心, 为了达到网格的疏密有致, 及提高计算精度(尽量避免一条网格线贯穿于整个计算域), 需要同一区域进行不同的块划分, 即使对本文所用的这个单一街道峡谷模型也需将整个区域划分为几部分, 而非结构网格在一定程度上避免了上述缺点, 这一点在复杂结构计算时显得尤为突出。

②在自适应网格调节时, 非结构网格表现出更加合理的网格的均匀性和光顺性^[9], 从图 3-15 中可以看出, 非结构网格的计算结果, 在建筑物顶部和底部的无量纲浓度值比结构性网格更大一些, 建筑物中部基本相等, 这说明非结构网格在拐角处的计算时, 表现得更好。图 3-16 是经过相同的速度梯度加密后的结构和非结构网格显示。加密网格处主要在街道低层左侧和上侧, 非结构网格要明显多于结构网格, 这可能就是导致结果不同的原因之一。

虽然非结构网格较结构网格在准确度上有一定缺点, 但是, 在一般情况下, 不会对计算结果的误差产生重大的影响。由于本文后续的计算有以下特点: 所用

模型存在多个钝体建筑物，流场较复杂；经过合理计算域检验，发现计算域均不大。以上两点说明，非结构网格更适用于建筑群间污染的扩散问题。

3.1.6 小结

本节首先确定了合理的计算域，建立了开放环境和城市环境下单一街道峡谷的数值模型，并对其准确性进行了验证，发现结果与风洞实验符合很好。

分析了开放环境和城市环境下街道峡谷中污染物扩散规律不同的原因，确定了对污染物扩散模拟有重要影响的因素。

比较了三种 $k-\varepsilon$ 模型的模拟结果，结合水平方向的模拟及他人的研究成果，确定 RNG $k-\varepsilon$ 模型在此类问题研究中的优势地位。

分析了结构网格和非结构性网格的差别，得出非结构网格更适用于复杂流场模拟。

3.2 二维点源污染对建筑小区影响的数值模拟

本章采用二维 RNG $k-\varepsilon$ 湍流模型模拟了单建筑物和双排多建筑物情况下的污染物浓度分布。研究发现，污染物的迁移扩散是由建筑物周围的风速场及湍流扩散系数分布确定的。通过优化建筑物的分布位置，可以有效地减少污染源在小区内高浓度分布区域^[54, 55]。

3.2.1 数值模型的建立

1、水平方向上的二维湍流模型

假设地面粗糙度均匀、建筑小区前面空旷、稳定大气边界层条件时，取一水平面（如图 3-17）作为研究对象。该水平面除在建筑物及其附近位置发生变化外，其余地方的风速一致， k 、 ε 也一致。

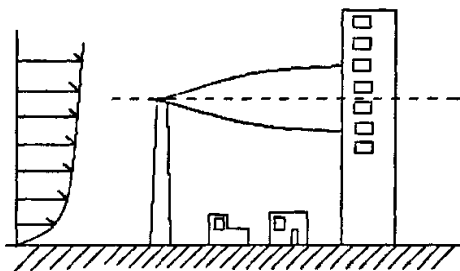


图 3-17 虚线为所取的水平方向的计算面

从二维模型的物理意义出发,如图 3-18 (a),建筑物平面代表的是无限高的建筑物,点源也对应无限长线源,为此,该模型还要假设建筑物较高及污染源在竖直方向上无扩散。

经过以上假设之后,认为本模型应该能近似的研究如图 3-17 虚线所示的水平面的污染物浓度分布情况。

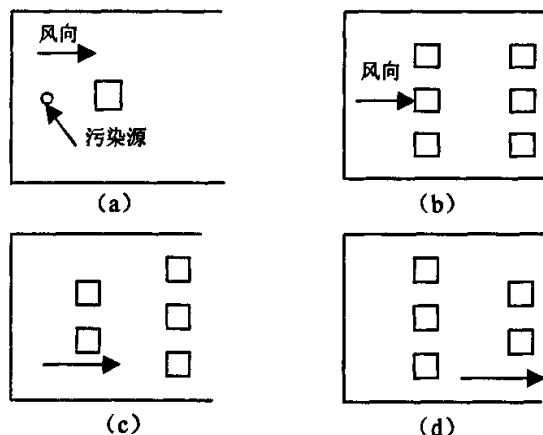


图 3-18 单建筑多建筑模型示意

(a) 单建筑 (b) 多建筑结构一 (c) 多建筑结构二 (d) 多建筑结构三

2、边界条件

进流边界取均匀流速 $u_i = 5\text{m/s}$; 出流边界采用完全发展出流边界条件; 两侧边界, 用对称边界条件; 建筑物边界用无滑移的壁面条件。

为了使研究结果具有普遍性, 以建筑物迎风宽度 H 、空气粘性系数 μ 、入流流速 u_i 、恒定引入点源 Q_e 来无量纲化。计算中, 取 $H = 15\text{m}$, 建筑物尺度均为 $H \times H$ 。 $u_i = 5\text{m/s}$, 那么雷诺数 $Re = \rho u_i H / \mu = 5.13 \times 10^6$ 。计算流域定为 $100H \times 30H$ ^[7]

(水平面由于无边界层问题, 只考虑边界条件和建筑物影响即可)。选取无量纲坐标系来表示污染源和建筑物的空间位置。取恒定引入点源强为 $Q_e = 0.01\text{m}^3/\text{s}$, 污染物的无量纲浓度为 $K = u_i C H^2 / Q_e$ 。

3.2.2 计算结果及分析

1、单建筑物情况时

图 3-19 为建筑物周围风速场。可以看出, 在建筑物迎风面两边出现高风险区, 在建筑物两个侧面和背面均产生了旋涡区。由于建筑物的存在, 建筑物后区湍动能和湍流耗散率增加, 会使湍动扩散系数 D_t 增加 (图 3-20)。在计算域内大部分地区, D_t 的量级为 10^{-2} , 但是在建筑物后部尾流区, D_t 很大, 最大值达到 $2.58\text{m}^2/\text{s}$ 。

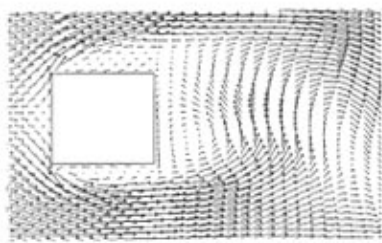


图 3-19 建筑物周围风速场

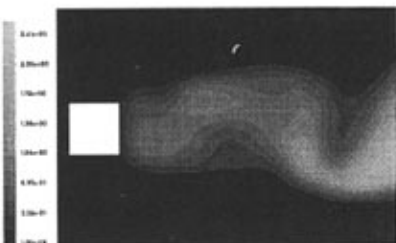


图 3-20 建筑物周围湍动扩散系数 D_t 的分布

(1) 污染源位于建筑物上风向情况

考虑污染源在建筑物上风向 $(-6H, 0)$ 处, 污染物浓度分布如图3-21(a)所示。在建筑物前大部分地区污染物扩散远小于污染物的推流迁移, 因此, 污染源离建筑物越近, 建筑物四边的污染物浓度越大, 尤其是建筑物迎风面, 成为污染物主要积累地带。

若保持污染源的横向坐标不变, 调整纵向坐标。当污染源的纵向坐标位于 $\pm 0.6H$ 之间时, 污染源对建筑物墙壁处浓度有影响, 而污染源位于此范围之外时, 污染源对建筑物墙壁处基本无影响, 见图3-21(b)。这和建筑物周围的风速场有直接关系(图3-19), 由于建筑物的阻挡, 风向两个拐角方向倾斜, 导致污染物迁移扩散方向改变。

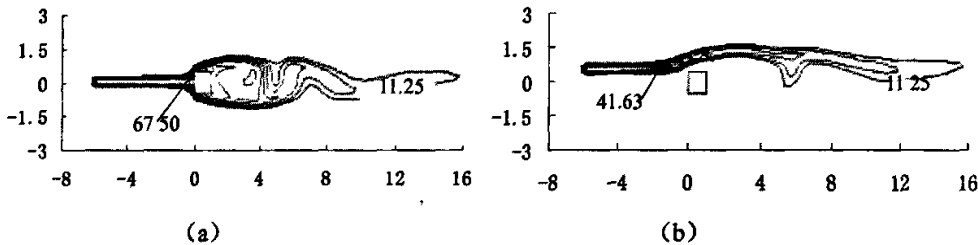


图 3-21 污染源在建筑物迎风区时的 K 分布
(a) 污染源在 $(-6H, 0)$ (b) 污染源在 $(-6H, 0.7H)$

(2) 污染源位于建筑物下风向情况

从图3-20可以看出, D_t 在建筑物后尾流区较大。污染源位于建筑物后时, 扩散速度加快, 如图3-22(a)所示。当污染源离建筑物小于 $4H$ 时, 回流会将污染物累计在建筑物的背风侧, 增大建筑物受污染的风险, 见图3-22(b)。只有超过一定距离, 才能使建筑物免受尾流的影响。

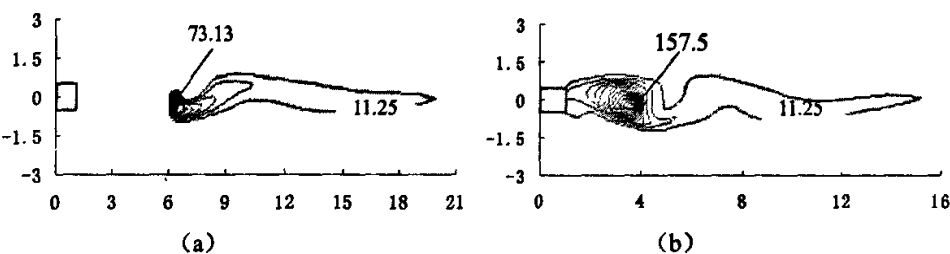


图 3-22 污染源在建筑物背风区时的 K 分布
(a) 污染源在 $(6H,0)$ (b) 污染源在 $(4H,0)$

2、多建筑物情况

为了简化，考虑建筑物尺寸为都为 $H\times H$ ，建筑物间侧间距为 H ，前后间距为 $3H$ 的建筑小区，研究小区建筑物分布、污染源位置对小区污染物浓度分布影响。

(1) 二排六栋建筑情况（结构一）

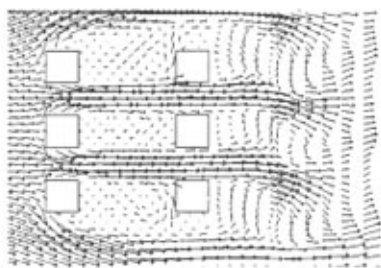


图 3-23 建筑群周围风速场

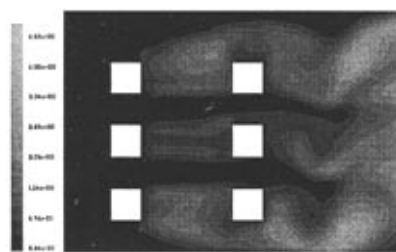


图 3-24 建筑群周围湍动扩散系数 D_t 的分布

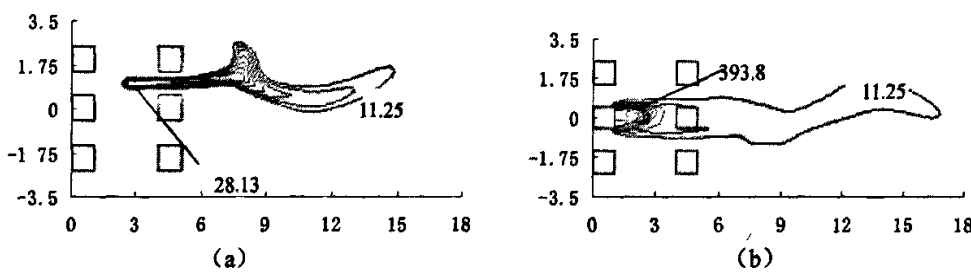


图 3-25 污染源在建筑小区中的 K 分布
(a) 污染源在 $(2.5H,1H)$ (b) 污染源在 $(2.5H,0)$

建筑物间风速场、 D_t 如图 3-23、24 所示，坐标原点位于第一排中间建筑物迎风面正中。当污染源位于两排建筑物之间时，若不断的改变其横向位置，当污染源的纵向位置在一定范围之内，污染物对各建筑均无明显的影响。当污染源位于 $(2.5H,1H)$ 时，对所有的建筑物影响最小（图 3-25(a)、表 3-1）。这主要是由于两排建筑物规则排列，形成了高速风道，有利于污染物迁移扩散。从图

3-23、24 还可看出，第一排建筑物后形成了一些低风涡旋和高 D_t 区，若将污染源放在这些地区，将导致污染物在建筑区内大范围扩散。污染源于 $(2.5H, 0)$ 时，影响最大（图 3-25(b)、表 3-2）。

(2) 二排五栋建筑情况（结构二）

建筑物周围的风速场、 D_t 如图3-26、27所示，坐标原点位于第一排两建筑物迎风面连线的正中。当污染源位于高风速、低 D_t 区时，污染物对小区的影响最小。但对于此结构，后排中间位置的建筑物阻挡了前排建筑物间的高风速通道，没有通畅的高风速低 D_t 区，因此，无论污染源在建筑群中的任何位置，都将造成较严重的污染。污染源位于 $(2.5H, 0)$ 时影响最小（图3-28(a)、表3-1），污染源位于 $(2.5H, 1H)$ 时影响最大(图3-28(b)、表3-2）。

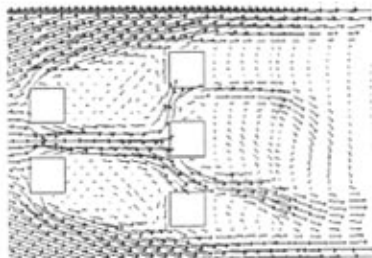


图 3-26 建筑群周围风速场

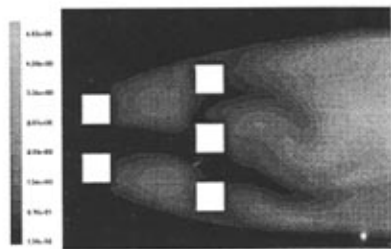


图 3-27 建筑群周围湍动扩散系数 D_t 分布

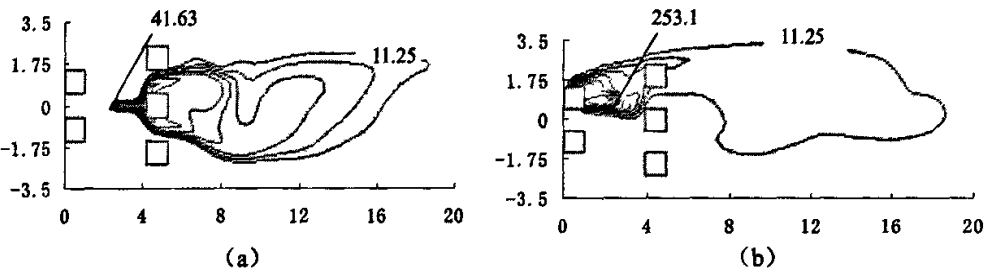


图 3-28 污染源在建筑小区中的 K 分布
(a) 污染源在 $(2.5H, 0)$ (b) 污染源在 $(2.5H, 1H)$

(3) 二排五栋建筑情况（结构三）

如果当建筑群的结构改为前三后二时，建筑物的风速场、 D_t 如图3-29、30 所示，坐标原点位于第一排中间建筑物迎风面正中。与本结构中存在一些污染物影响小的区域。当污染源位于 $(2.1H, 1.2H)$ 时，污染物影响最小（图3-31(a)、表3-1），当污染源位于 $(2.5H, 0)$ 时，影响最大（见图3-31(b)、

表3-2)。

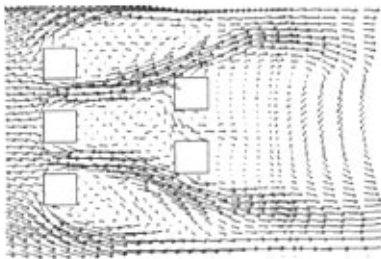


图 3-29 建筑群周围风速场

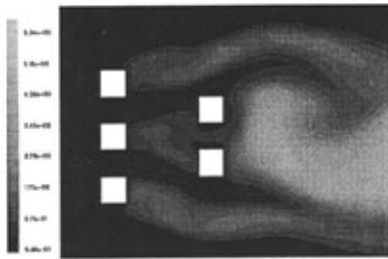


图 3-30 建筑群周围湍动扩散系数 D_t 分布

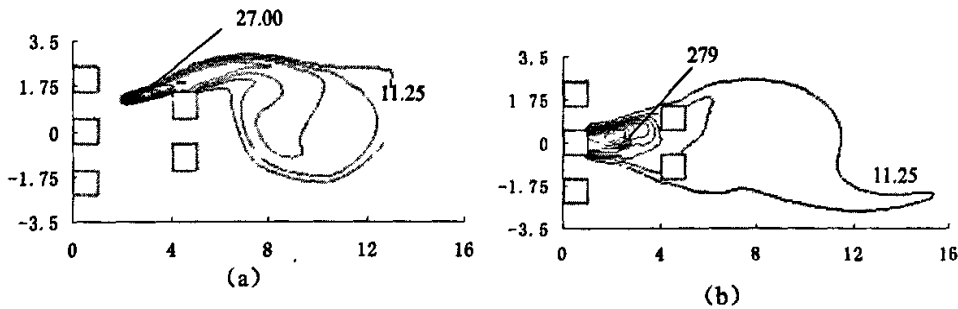


图 3-31 污染源在建筑小区中的 K 分布
(a) 污染源在 $(2.1H, 1.2H)$ (b) 污染源在 $(2.5H, 0)$

表3-1 污染物对建筑物壁面上的最小影响			
	结构一	结构二	结构三
无量纲最大浓度 (K)	≤ 11.25	42.19	15.98
无量纲平均浓度 (K)	≤ 11.25	25.54	14.74
无量纲最大影响距离 (H)	13.6	16.5	11.8

表3-2 污染物对建筑物壁面上的最大影响			
	结构一	结构二	结构三
无量纲最大浓度 (K)	256.2	154.5	170.6
无量纲平均浓度 (K)	86.74	65.59	46.80
无量纲最大影响距离 (H)	16.0	18.5	12.5

*注：最大影响距离表示污染物浓度小于设定浓度的空间点距污染源的最大距离，其是风速引起的推流和迁移扩散共同的结果

3.2.3 小结

从计算结果看出, 污染物在建筑群中的浓度分布与建筑群的结构密切相关。在考虑当地主要气象条件下, 通过合理安排建筑群结构, 可以有效地减少建筑小区内的污染物影响区域, 避免污染物积聚死角。研究得出以下主要结论:

①将污染源放在高风速、低 D_r 处, 污染物影响范围小, 利于污染物迁离小区; 反之, 污染物影响范围大, 不利于污染物迁离小区;

②染源位于单建筑物上风向时, 污染源离建筑物越近, 建筑物四边的污染物浓度越大, 尤其是建筑物迎风面, 成为污染物主要积累地带; 当污染源的纵向坐标位于 $\pm 0.6H$ 之间时, 污染源对建筑物墙壁处浓度有影响, 而污染源位于此纵向坐标范围之外时, 污染源对建筑墙壁处基本无影响;

③污染源位于单建筑物下风向时, D_r 在建筑物尾流区较大, 扩散速度加快。但当污染源靠近建筑物时, 回流会将污染物累计在建筑物的背风侧, 增大建筑物受污染的风险;

④结构三与结构一相比, 虽然在污染源位于建筑群内任何地方都达不到影响很小, 但是其最大污染物浓度和平均污染浓度比结构一小很多。另外, 二者皆有两条高风速、低 D_r 通道, 但结构一前排建筑物后面会产生比结构三大的污染区域; 结构三优于结构二, 因为结构三中的两条高风速、低 D_r 通道, 将有利于污染物的迁移。总之, 从建筑物及其周边的影响来看, 结构三造成的污染影响最小。

3.3 三维点源污染对建筑小区影响的数值模拟

3.3.1 数值模型的建立

1、为了验证二维模型所得结论的正确性, 本文设计了三维模型 (图 3-32), 稳定大气边界层。

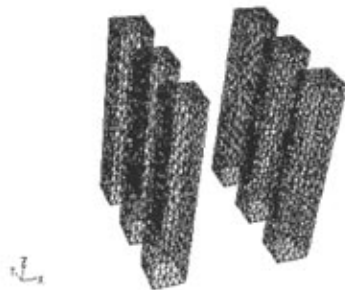


图 3-32 三维建筑模型示意图

2、边界条件及模型条件

进流边界取均匀流速 $u = 5 * (z/22.5)^{0.25}$, k 、 ε 取前面自己总结出的值; 出流边界采用完全发展出流边界条件; 两侧及上面边界, 用对称边界条件; 建筑物边界用无滑移的壁面条件。

建筑物长×宽×高为 $H \times H \times 9H$ 。计算流域定为 $20H \times 18H \times 20H$ 。选取无量纲坐标系来表示污染源和建筑物的空间位置。取恒定点源强为 $Q_e = 0.01 \text{ m}^3/\text{s}$, 污染源位于高 $4.5H$ 的水平面上, 污染物的无量纲浓度为 $K = u_i C H^2 / Q_e$, RNG $k-\varepsilon$ 湍流模型。

3.3.2 计算结果及分析

1、数值建筑小区模型 (结构二)

任意选了一种结构的楼区作对比研究, 结果及分析如下:

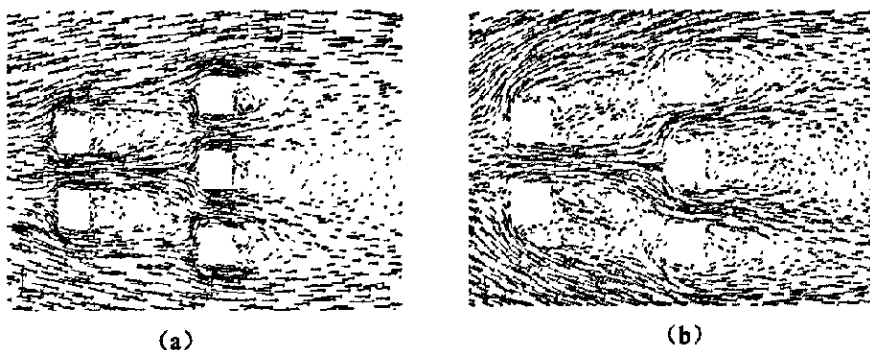


图 3-33 高层建筑风速场
(a) 67.5m 处 (b) 2.5m 处

(1) 从风场中可以看出, 与上节作二维水平风场分析时的假设不同的是, 在近地面处风场与二维情况更接近一些, 湍动效果 (图 3-33 (b)) 较高层处的建筑物风场较稳定 (图 3-33 (a)), 但还是不如二维情况波动明显 (图 3-26)。在 2.5-67.5m 中间及更高水平面取风场图观察时, 进一步证明了三维模型低处较高处波动明显。这很有可能是由于建筑物后面形成的垂直方向的涡旋所致, 而该涡旋到达高层建筑底部时明显减弱, 涡旋影响不大。

(2) 当污染源位于 45m 处时, 污染的分布如图 3-34 (a、b) 所示, 由于水平风场的稳定, 浓度的扩散形状并没有呈现出明显的钝体绕流波动。当将污染源也放于底部时, 扩散情况波动明显 (图 3-34 (c))。但是, 扩散的过程中, 污染物的浓度必定会造成地面反射的影响, 可能造成结果的不准确。

(3) 为了验证在建筑物高处和低处时的扩散规律是否准确, 本文将污染源放于不同位置 ($4.5H$ 和 $0.01H$ 水平面) 进行了研究。结果发现, 不同高度处污

染物的扩散规律均符合二维平面扩散规律，只在湍动效果上有差别，高处较低处稳定。以上结论说明，高层建筑物情况下，二维能模拟的平面范围很广。

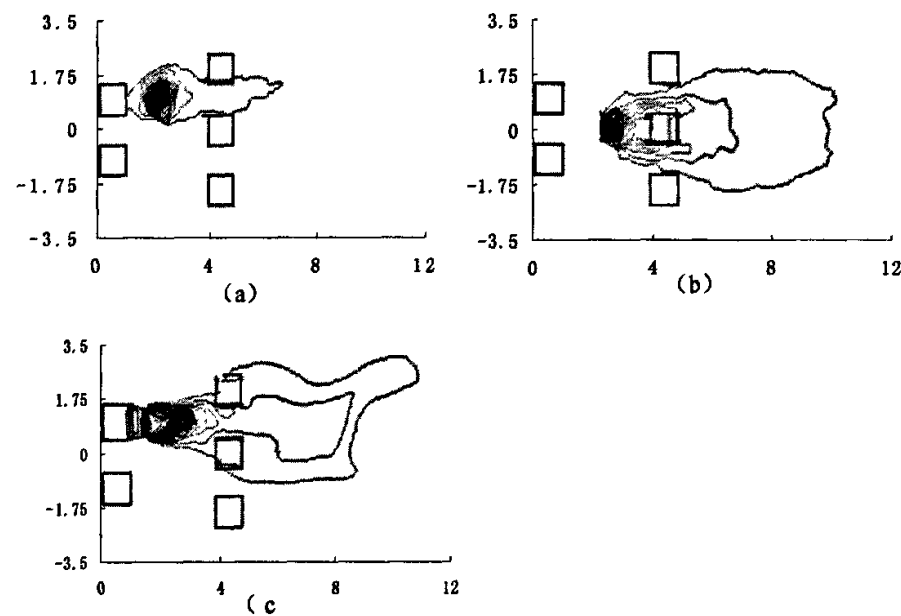


图 3-34 污染源在建筑小区中的 K 分布

(a) 污染源在 $(2.5H, H, 4.5H)$ (b) 污染源在 $(2.5H, 0, 4.5H)$ (c) 污染源在 $(2.5H, H, 0.01H)$

2、三维模型结果总结

在三维情况下，又验证了六建筑及另外一五建筑结构模型，当污染源位于水平面 $4.5H$ 时，模拟结果如表 3-3、3-4 所示：

表 3-3 污染物对建筑物壁面上的最小影响

	结构一	结构二	结构三
最大浓度 (K)	15.69	18.84	10.68
最大影响距离 (K)	10.2	4.5	5.5

表 3-4 污染物对建筑物壁面上的最大影响

	结构一	结构二	结构三
最大浓度 (H)	23.68	20.27	23.24
最大影响距离 (H)	7.3	7.4	6.4

(1) 综合各种情况来看，风速场的情况均与上面类似，即高空处的风速场

比低空处稳定。从浓度场情况来看,三维结浓度场扩散形状比二维情况稳定,扩散规律均与二维情况基本吻合。结构三中点源位于 $(2.1H, H, 4.5H)$ 时的最大污染浓度最小。

(2) 与二维情况的不同之处有:当点源位于影响最小处时,三维结构二的最大影响距离小于结构三的;结构一中三维不同位置的污染源的最大影响距离情况与二维相反。导致这两点不同的原因可能是由于建筑物后面并没有形成明显的高风速通道(垂直涡旋风的影响),使得污染物的迁移扩散作用减弱所致。

3.3.3 小结

本节对比了三维模型和二维模型的计算结果。在该模型条件下,用三维模型分析得出的污染物扩散趋势与二维结果基本一致。虽然真实情况中垂直湍流及地面反射会对结果的准确性带来影响,但是,用二维模型定性计算均一地面粗糙度下水平方向上的污染物扩散规律是可行的。

3.4 二维及三维模型比较与总结

3.4.1 二维模型的优点

由于建筑群间污染物三维扩散模拟需要的计算量非常大^[67],在当今的计算机条件下,很难进行多个建筑物间污染物浓度分布模拟。那么,如果我们先利用二维模型找到污染物扩散的一定规律,找出可能的优化建筑物位置或污染源放置的最佳位置,再在三维条件下进行验证,这将大大的节约优化时间。

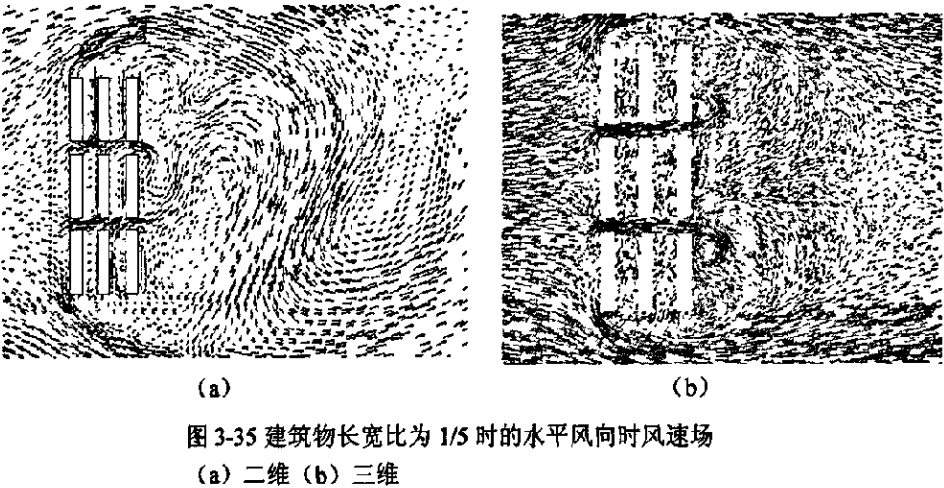
在研究建筑物间污染物扩散规律时,用竖直平面上的二维街道峡谷模型代替三维街道峡谷的研究是可以的,它相当于线源扩散的模拟,这一点前人已作过大量的验证;而对水平面,由于存在着复杂的钝体绕流运动,造成二维模型结果与三维模型结果存在一定偏差。经过我们验证,发现二维水平模型也可在一定程度上定性地反映出多个建筑物间污染物浓度分布的趋势。

3.4.2 二维模型的缺点

由于钝体绕流问题的存在,当建筑物的长宽比相差较多时,在二维计算中,如图 3-35 所示,通过建筑物后的风场波动效果比三维模型明显,产生的涡旋较大。可能原因是:受模型维数的限制,同样尺度的钝体建筑物,在二维情况下的钝体绕流比三维模型明显,尤其是当建筑物间距小,导致雷诺数计算中的有效距离增大,使雷诺数增高时,这种现象就更加明显了。在这种情况下,用二维模型

来计算，会存在较大的差别。

另外，二维模型没有考虑到垂直方向上的污染物扩散，不适用于垂直方向湍流较强的大气污染物扩散情况（如较低层的建筑物引起的纵向涡旋，凸凹不平的地面等），同时，地面的反射影响也被忽略了。



3.4.3 优化模拟方法

介于二维模型计算速度快、省时、建模容易等优点，本文建议在研究复杂结构建筑小区优化问题时（地面粗糙度均匀、稳定大气边界层、建筑物长宽比相差不太大等条件下），先在二维上进行不同优化方法的比较，得出一些定性的规律，再在三维下验证其污染物的定量分布，从而在很大程度上尽快的得出建筑物优化分布位置。

3.5 线源污染对建筑小区影响的数值模拟

前面重点讨论了点源污染对建筑群的影响，本节将重点研究线源污染对建筑小区的影响。将有九栋建筑物的小区放在十字交叉马路的不同位置，研究线源（由机动车尾气排放引起的污染，本研究设计为稳态线源）的扩散规律及对建筑小区的影响。

3.5.1 数值模型的建立

1、二维线源模型示意图如下图所示：

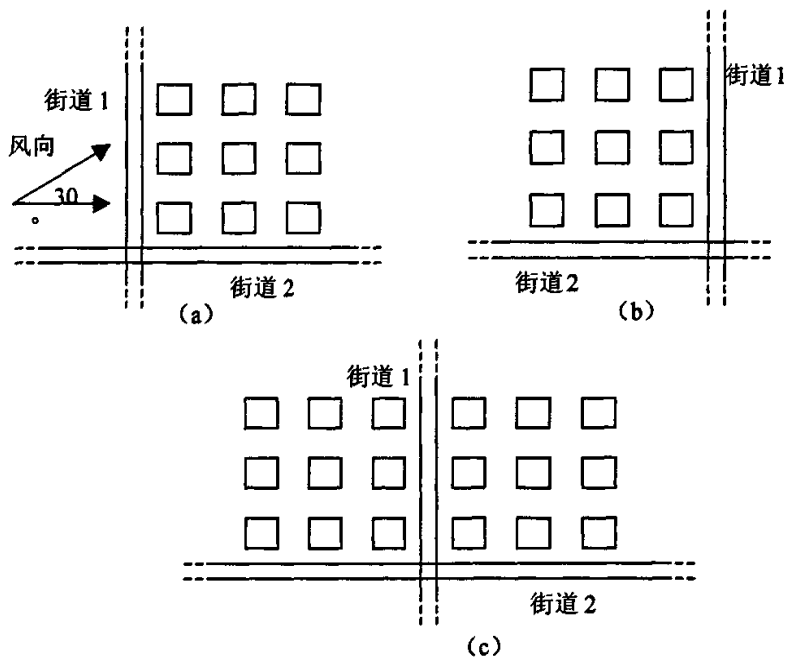


图 3-36 二维线源模型示意图
(a) 结构一 (b) 结构二 (c) 结构三

2、边界条件及模型条件

进流边界取均匀流速 $u=5\text{m/s}$, k 、 ε 取前面自己总结出的值；出流边界采用完全发展的出流边界条件；两侧用对称边界条件；建筑物边界用无滑移的壁面条件。

RNG $k-\varepsilon$ 湍流模型，建筑物尺度为 $H\times H$ ，建筑物间距为 H ，街道为相互垂直十字交叉结构，街道的宽度为 $2/3H$ ，建筑物距街道的距离为 $1/5H$ ，取恒定的线源，街道1、2上单位面积上污染物的平均浓度相同，源强为 $Q_e=0.01\text{m}^3/\text{s}$ 。

3.5.2 计算结果及分析

1、结构一模型分析

为了进一步验证二维模型的可靠性，本节仍使用一个三维模型作对比（建筑物为 $H\times H\times 9H$ ，线源高度为 $1/5H$ ），并在水平及与水平方向成 30° 度角的两种不同风向条件（如图 3-36 (a)）下研究了道路交通线源污染对建筑小区的影响，得出了各种结构下线源污染物扩散的影响趋势，并给出了建筑物位置与风向的一些关系。

(1) 水平风向计算后，模型的风速场及浓度场分布如下图：

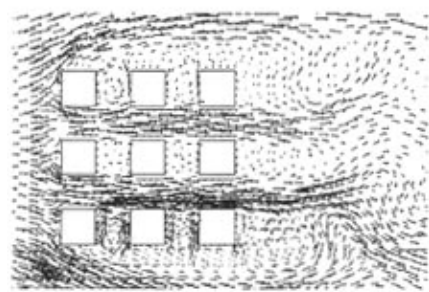


图 3-37 结构一风速场(二维、水平风向)

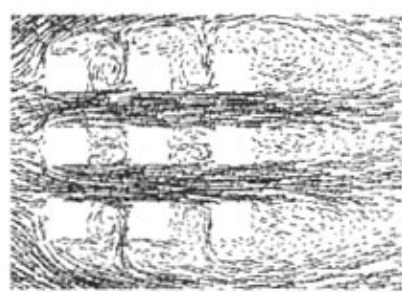


图 3-38 结构一风速场(三维、水平风向)

图 3-37、3-38、3-39 给出了二维三维浓度场风速场，分析如下：

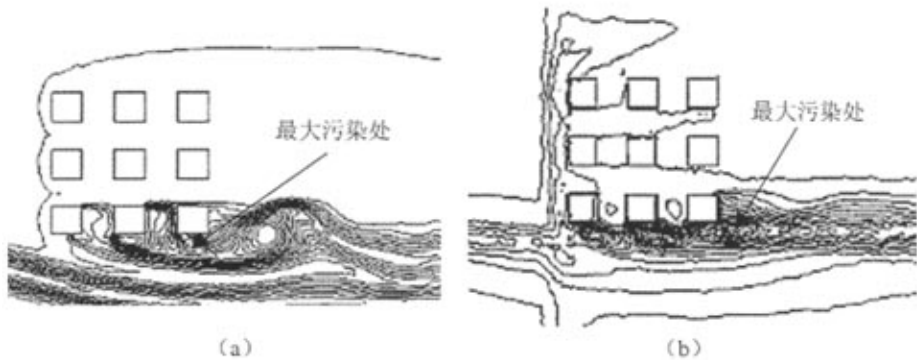


图 3-39：污染物浓度等值线分布

(a) 结构一、二维、水平风向 (b) 结构一、三维、水平风向

①本例算的是靠近地面处的水平面扩散情况，三维图在地面处的水平风速波动程度比二维情况小，符合前文规律。二、三维图中每一个建筑物背风向处均出现了明显的低风速涡旋区，这些都体现出流体的钝体绕流性^[56]，整体趋势基本一致。

②从二、三维浓度场可以看出，整个建筑群中，重污染区集中在靠近道路 2 的一侧，可见此处建筑物背风面存在的低风速涡旋区，不利于污染物的扩散。而线污染源又正好处在这些涡旋区中，使得污染物源浓度还没来得及降低就发生了积累。

③浓度场涡旋处与风速场涡旋图相吻合。污染物在整个区域中出现最大浓度处如图 3-39 所示。值得一提的是，最大污染浓度出现在后面的两建筑物附近，而并不是最靠近十字路口的那个建筑物，这是由于前面的两个涡旋中积累的污染物随着风向迁移累计造成的。二、三维情况基本一致。

④建筑小区另外 6 建筑主要受街道 1 的污染源影响,因为在该区形成了高风速通道,阻止了街道 2 污染物向小区内部扩散。

(2) 当风向倾斜于水平方向 30 度时,模型的风速场图和浓度图如下所示:

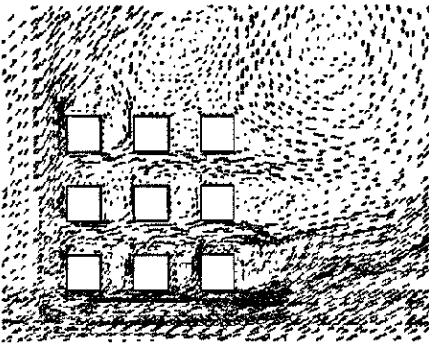


图 3-40 结构一风速场(二维、30° 风向)

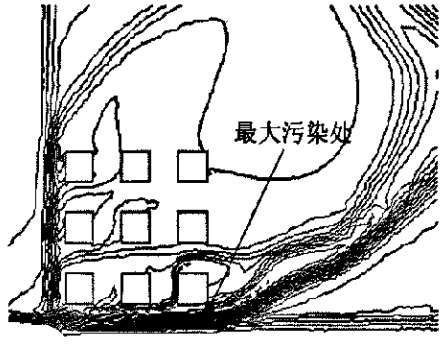


图 3-41 污染物浓度等值线分布(结构一、二维、30° 风向)

从本例以后的研究均为二维模型,图 3-40、3-41 给出了风速场、浓度场图:

①风向为 30 度时,建筑物间并没有形成高风速通道,建筑小区内部受污染情况复杂,小区内各建筑所受的污染应该是街道 1、2 共同作用的结果。

②建筑小区整体受到的污染影响减小,污染仍重点集中在街道 2 的两侧,最大污染的数值明显减小,比风向水平时小了近五倍,这是因为线源的位置并不在建筑物附近的低风速涡旋区中,而是扩散一小段距离浓度下降后进入该区的。

③污染最严重的建筑仍是最后面的 1 栋建筑的靠街道侧,而且该栋建筑物四周在整个小区中受污染影响最大。

④该结构时,两种不同风向下,受污染最严重处均集中在靠近街道 2 的一侧。

2、结构二模型分析

结构二的风速场图同结构一,浓度场图如 3-42 所示,从图中可以看出:

(1) 水平风向时,从污染情况来看,受污染最严重的是靠近街道 1 的一侧,且有五栋楼处于污染区之外,因为该结构的高风速通道阻止了街道 2 的污染物向小区内部扩散。30 度风向时,污染也集中在街道 1 的一侧。

(2) 水平风向时,污染最大处出现在接近十字路口处,30 度时出现在比水平风向污染最大处靠上的位置,最大污染浓度也小于水平风向时,这点与结构一相同,但差别不如结构一明显,因为线源街道 1 仍位于建筑物附近的低风速涡旋区中。

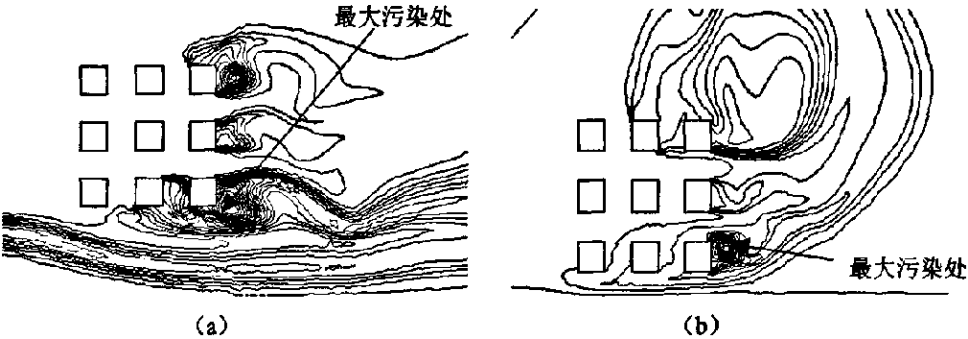


图 3-42 污染物浓度等值线分布二维
(a) 结构二、水平风向 (b) 结构二、30° 风向

3、结构三的风速场及浓度场图如下所示：

图 3-43、3-44 给出了二维模型在风向为水平及 30 度时的风速场、浓度场：

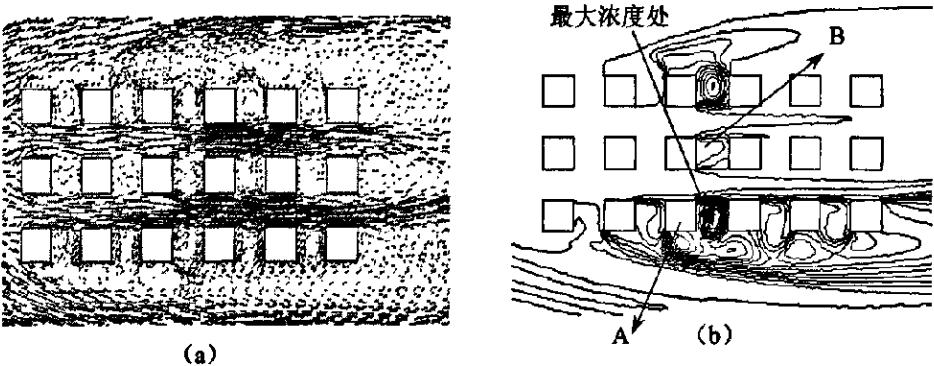


图 3-43 结构三、二维、水平风向
(a) 风速场 (b) 污染物浓度等值线分布

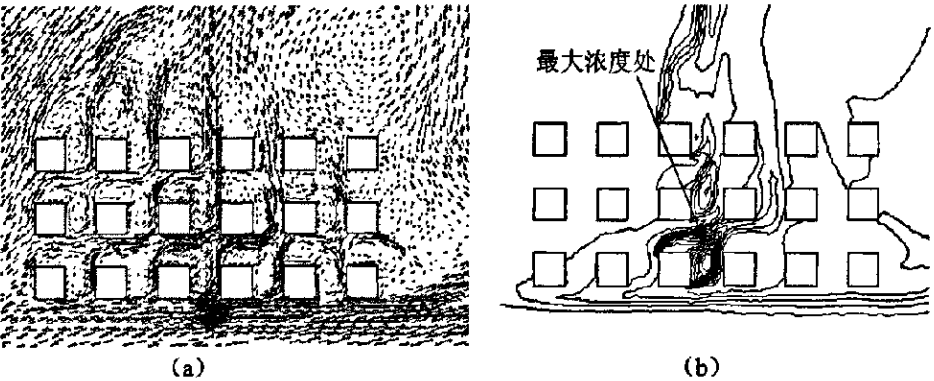


图 3-44 结构三、二维、30° 风向
(a) 风速场 (b) 污染物浓度等值线分布

(1) 水平风向时, 从污染情况来看, 受污染严重处的是靠近街道 1 的两侧有建筑物区域。30 度风向时, 污染也集中在街道 1 的两侧, 尤其是建筑物 A (图 3-43(b)) 附近的低风速涡旋区。

(2) 水平方向时, 街道 1 侧 B 区 (图 3-43(b)) 并没有形成同其它两处一样的污染物累积区域, 造成这种现象的原因有: 由于该处两边都有高风速通道的存在, 两边的污染物很快被风带, 而 B 区的污染物向两边产生了扩散; 另外, B 处的涡旋风速也有所提高, 增大了污染物的湍流扩散系数, 使得污染物扩散加快。

(3) 水平风向时, 污染最大处出现在 A 建筑十字路口偏上处, 由于该处线源街道 1、2 均处于 A 建筑物后面的低风速涡旋区, 所以浓度也最大, 是其他情况的三倍 (见表 3-5)。30 度时最大污染处比水平方向偏上, 但是最大污染浓度却减小很多。

(4) 水平方向时, 街道 1 的背风向浓度大于顺风向浓度, 这与前面得出的街道峡谷污染物扩散 (3.1.2) 结果相吻合, 进一步证明了二维模型的正确性。

3.5.3 小结

各种结构中污染物的最大浓度如下表所示:

表 3-5 楼区中污染物的最大浓度			
风向\浓度	结构一	结构二	结构三
水平	0.103	0.142	0.370
30°	0.0295	0.1278	0.1320

从表 3-5 中看出:

(1) 结构一、二、三在水平风向时, 最大污染物浓度是大于风向 30 度情况的, 这些都说明了水平风向在形成高风速通道的同时, 也存在之相对稳定的低速涡旋区, 在这些地区污染物是不容易扩散的。

(2) 结构三在水平风向时, 产生了最大的污染物浓度, 说明街道两侧有建筑物存在不利于污染物扩散, 从这点来说, 结构一、二比结构三要合理一些, 不会让污染物积累在两建筑物间以至扩散不出去。当风向为 30 度时, 最大污染浓度仍遵循该规律。

(3) 结构一与结构二相比, 无论是水平还是 30 度风向, 结构一的浓度都小一些, 这主要是因为结构一中很多建筑物后面形成的低速涡旋区并没有线源的存在, 尤其当 30 度风向时, 线源没有一处是位于低风速涡旋区的, 为此其最大污染物浓度最小。综上所述, 结构一的效果要明显好于结构二。

第四章 非稳态微生物污染物对建筑小区影响的数值模拟

本章尝试了一种非线性动力学方程组的参数反求方法,并提出了计算机图形识别功能在数据处理方面的应用;首次将病毒群体动力学模型引入到污染物扩散方程中,作为非稳态污染源,研究了微生物非稳态污染源对建筑小区的影响,得出了建筑群及单个建筑面上的污染物随时间的扩散规律,并研究了微生物污染物在不同时刻进行隔离后的变化规律,为建立可在空气中传播的微生物预警系统提供了依据。

4.1 微生物模型的确定

参数反求问题一直是学者研究的热点^[58],对于本文所选用的病毒感染群体动力学模型来说,如果能通过实验数据来反求动力学方程组的所有参数将是很有意义的^[59]。从文献得出,可用于反求动力学方程组参数的方法有拟牛顿法、最速下降法、高斯-牛顿法、阻尼最小二乘法、贝叶斯统计、单纯形法、模拟退火算法、遗传算法、马尔科夫链法、蒙特卡罗法等,各种方法都有自己的优劣势。考虑到本系统的一些特殊性,本文使用了牛顿法-非线性最小二乘法相结合的方法进行了系统参数的估计。

4.1.1 反求动力学方程组参数的尝试

本文所选用的微生物生长动力学方程组如下(详见 2.4.2 节):

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \lambda - ex - \beta vx \\ \frac{dy}{dt} &= \beta vx - ay \\ \frac{dv}{dt} &= ky - uv\end{aligned}$$

1、反求参数的数学过程

该方程组为非线性的全微分方程组,有六个参数,且从生物学意义来说,整个方程中只有游离病毒数 v 是可通过实验测出的,为此,模型参数反求难度较大。本文进行了一种方法的尝试,具体如下。

由于此非线性动力学方程组的特殊性，可先将其化为关于 v 的高阶方程：

$$\begin{aligned} (v_n^{\cdot} v_n - v_n^2)(a+u) - v_n^2 k \beta \lambda + v_n^{\cdot} v_n e + v_n v_n^{\cdot} e(a+u) + v_n^2 e a u \\ + v_n^2 v_n^{\cdot} \beta + v_n^2 v_n^{\cdot} \beta(a+u) + v_n^3 \beta a u = v_n^{\cdot} v_n^{\cdot} - v v_n^{\cdot} \end{aligned} \quad (4-1)$$

设变量：

$$\begin{aligned} x1 &= a+u & x2 &= k\lambda & x3 &= au \\ x4 &= e & x5 &= \beta \end{aligned}$$

相应的病毒数据设：

$$\begin{aligned} v_n^{\cdot} v_n - v_n^2 &= Q1_n & -v_n^2 &= Q2_n & v_n^{\cdot} v_n &= Q3_n \\ v_n v_n^{\cdot} &= Q4_n & v_n^2 &= Q5_n & v_n^2 v_n^{\cdot} &= Q6_n \\ v_n^2 v_n^{\cdot} &= Q7_n & v_n^3 &= Q8_n & v_n^{\cdot} v_n^{\cdot} - v v_n^{\cdot} &= b_n \end{aligned}$$

将各个变量带入公式 (4-1) 得：

$$\begin{aligned} F_n &= Q1_n x1 + Q2_n x2 x5 + Q3_n x4 + Q4_n x1 x4 + Q5_n x3 x4 + \\ &Q6_n x5 + Q7_n x1 x5 + Q8_n x3 x5 - b_n \end{aligned} \quad (4-2)$$

从而转化成超定方程组，再将 v 的高阶用差分方法近似代替（经计算，二阶差分精度格式即可）^[60]。对此方程进行求解，可采用非线性最小二乘估计的迭代解法，通常使用牛顿法^[61]，但由于超定方程组的数据太多，计算量非常繁琐，故对其进行了简化处理，格式如下：

$$x^{(k+1)} - x^{(k)} = Y^{(k)} \quad (4-3)$$

$$F'(x^{(k)})Y^{(k)} + F(x^{(k)}) = 0 \quad (4-4)$$

整理为

$$F'(x^{(k)})x^{(k+1)} = F'(x^{(k)})x^{(k)} - F(x^{(k)}) \quad (4-5)$$

设 $F'(x^{(k)})$ 为 A ， $F'(x^{(k)})x^{(k)} - F(x^{(k)})$ 为 B ，方程变为 $Ax = B$ 的超定方程组，再用最小二乘迭代法^[62]求出所求参数。

为减少误差，提高收敛半径，求逆时要引入谱修正法，对条件数进行修正，可得到更合理的结果。修正方法如下，将公式 (4-6) 变为公式 (4-7)。

$$(A' A)^{-1} A' B \quad (4-6)$$

$$(A+1)^{-1}(B+x^{(k)}) \quad (4-7)$$

整个参数反求的算法如下：

- ① 设初值 $c_0 = (x1^0, x2^0, x3^0, x4^0, x5^0)$ ；
- ② 算出 $F'(x^0)$ 和 $F'(x^0)(x1^0, x2^0, x3^0, x4^0, x5^0)^T - F(x^0)$ ；

- ③最小二乘拟合出 $(x1^1,x2^1,x3^1,x4^1,x5^1)^T$ 的值;
- ④输出结果 $c_1 = (x1^1,x2^1,x3^1,x4^1,x5^1)$, 当 $\Delta>10^{-8}$ 时, 把 c_1 代入循环(1), 当 $\Delta<10^{-8}$ 时结束。

2、该方法存在的问题

该方法虽能通过病毒生长曲线反求出非线性全微分方程组的六个参数,但是该方法对 v 曲线的要求较高, 必须达到一定的数据量, 且计算的收敛半径小。如何提高该方法的收敛半径, 还需要进一步的研究和修正; 而数据量的问题, 可通过计算机的图形识别技术来实现。

对于数据点不太多的实验来说, 为了达到一定的数据量, 具体做法是先将所测的数据点之间用平滑的曲线连接 (Excell 就可实现), 再将所产生的图像用 Matlab 的图像识别功能来读图, 读出的数据经过一定程序处理后, 即可作为本文所需的数据点来使用。该方法能以最直接的方式增加曲线的数据量, 为曲线的拟合、以及复杂参数的反求带来方便。

4.1.1 微生物生长曲线的确定

为了引入微生物污染源随时间的变化曲线, 本文可先采取前人使用的动力学方程参数^[44](表 4-1), 并通过标准 Runge-Kutta 方法模拟出微生物生长变化曲线, 来作非稳态污染源。

表 4-1 动力学方程组各参数的取值

Parameter	λ	β	e	k	a	u
Value	1000	0.001	0.1	50	0.5	5

该方程组的 Runge-Kutta 格式如下^[65]:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)$$
$$v_{n+1} = v_n + \frac{h}{6}(r_1 + 2r_2 + 2r_3 + r_4)$$

$$k_1 = f_1(x_n, v_n)$$
$$k_2 = f_1(x_n + \frac{h}{2}k_1, v_n + \frac{h}{2}r_1)$$
$$l_1 = f_2(x_n, y_n, v_n)$$
$$l_2 = f_2(x_n + \frac{h}{2}k_1, y_n + \frac{h}{2}l_1, v_n + \frac{h}{2}r_1)$$
$$r_1 = f_3(y_n, v_n)$$
$$r_2 = f_3(y_n + \frac{h}{2}l_1, v_n + \frac{h}{2}r_1)$$
$$k_3 = f_1(x_n + \frac{h}{2}k_2, v_n + \frac{h}{2}r_2)$$
$$k_4 = f_1(x_n + hk_3, v_n + hr_3)$$

$$\begin{aligned}
 l_3 &= f_2\left(x_n + \frac{h}{2}k_2, y_n + \frac{h}{2}l_2, v_n + \frac{h}{2}r_2\right) & l_4 &= f_2(x_n + hk_3, y_n + hl_3, v_n + hr_3) \\
 r_3 &= f_3\left(y_n + \frac{h}{2}l_2, v_n + \frac{h}{2}r_2\right) & r_4 &= f_3(y_n + hl_3, v_n + hr_3)
 \end{aligned}$$

取步长为 $h=1s$ ，初值 $x_0=20000$ ， $y_0=0$ ， $v_0=5$ ，迭代 6000 步，曲线刚达到平衡点时，所得曲线（图 4-1），作为下面要研究的非稳态污染源源强。

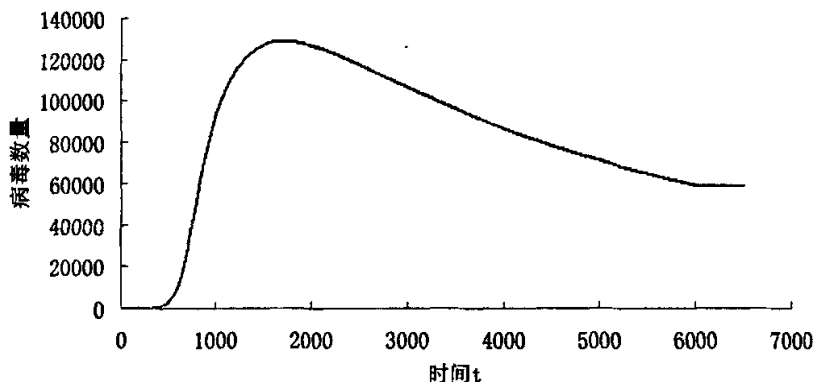


图 4-1 非稳态污染源变化曲线

4.2 非稳态微生物污染物对建筑小区影响的数值模拟

4.2.1 数值模型的建立

在非稳态计算时，从二维到三维模型的计算方法的优势就更加明显了，在开始进行多种情况的摸索时，尤其是步长很小时，计算量相当大且耗时。由于二维情况下，可看到污染物扩散的趋势，所以这里本文只用二维模型对非稳态微生物污染物在空气中的扩散进行了模拟。非稳态模拟选用的模型如图 4-2 所示：

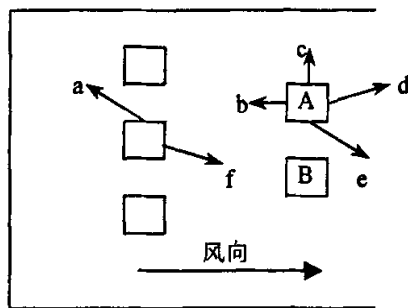


图 4-2 二维非稳态污染源扩散模型

设楼群中的 a 墙面为非稳态微生物原始污染源, 并认为在所计算的时间内无新的诱发污染源出现情况下的污染物扩散规律, 设总的计算时间为 T ($T=6000s$), 微生物的源强如上(图 4-1), 研究了微生物浓度 >20000 个/ m^3 (相当于实际中微生物的有效致病条件) 时的浓度分布图。边界条件同 3.2.1 节。

4.2.2 计算结果及分析

1、由于污染源的非稳定特性, 得出了污染物扩散随时间周期变化:

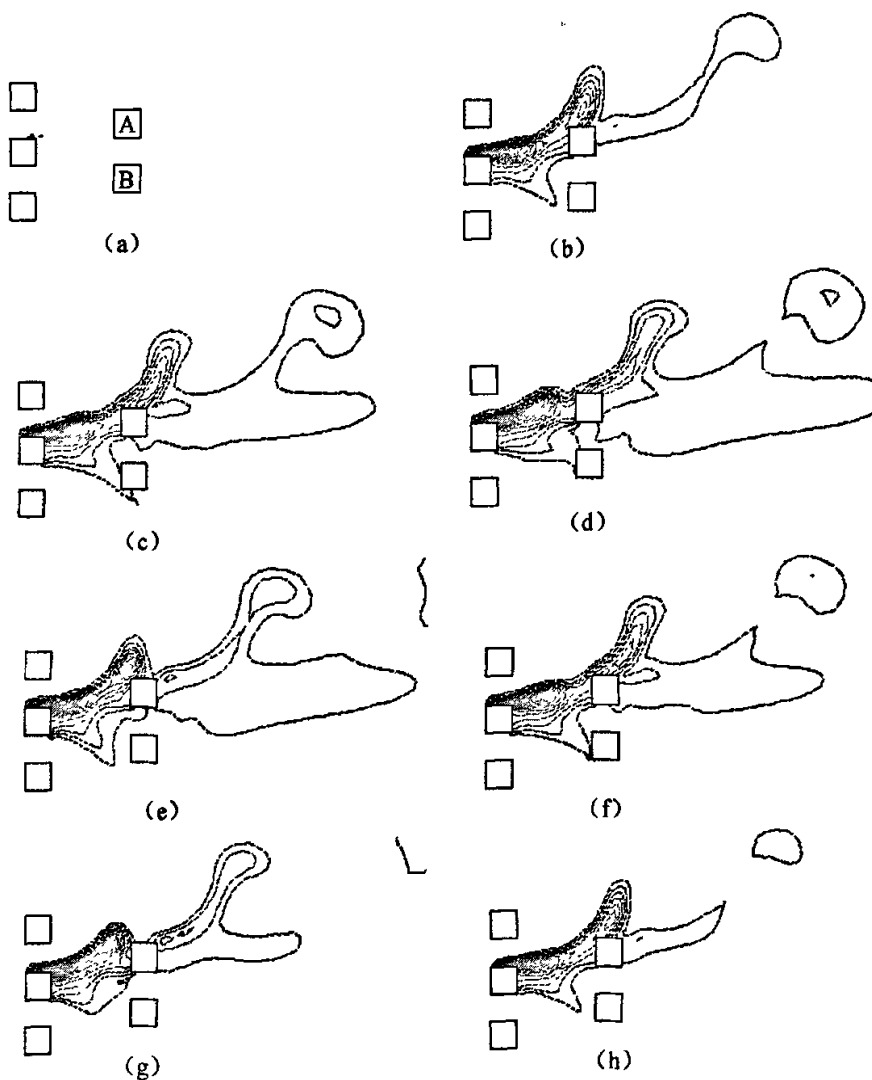


图 4-3 微生物污染物浓度分布随时间的变化

(a) $1/12T$ (b) $1/6T$ (c) $1/4T$ (d) $1/3T$ (e) $1/2T$ (f) $2/3T$ (g) $5/6T$ (h) T

(1) 同生物的生长曲线类似, 对于本例来说, 微生物污染在 $1/12T$ 的潜伏期之后开始出现, 之后立即进入对数增长期, 浓度很快升高, 污染面积扩散快。在 $1/4T$ 之后进入稳定期, $1/3T$ 之后进入衰退期, 其变化如图 4-3 所示。

(2) 从图中可以看出, 当微生物污染源在 a 侧扩散时, 建筑 A 四周将受到严重的威胁, 而建筑 B 则在最初的微生物污染对数增长期受到一些影响, 当微生物进入平稳及衰退期后, 无影响。其余两栋建筑物不受影响。

(3) 建筑物后面形成的浓度脱落涡也将对整个建筑小区后面的地区产生影响, 尤其是微生物污染物处于对数生长期时的有效致病浓度脱落涡面积要大于衰退期的。

2、建筑物 A 的各墙面 (见图 4-1) 受污染浓度随时间的变化

图 4-4 给出了污染物在各墙面上平均浓度变化, 从图中可以看出:

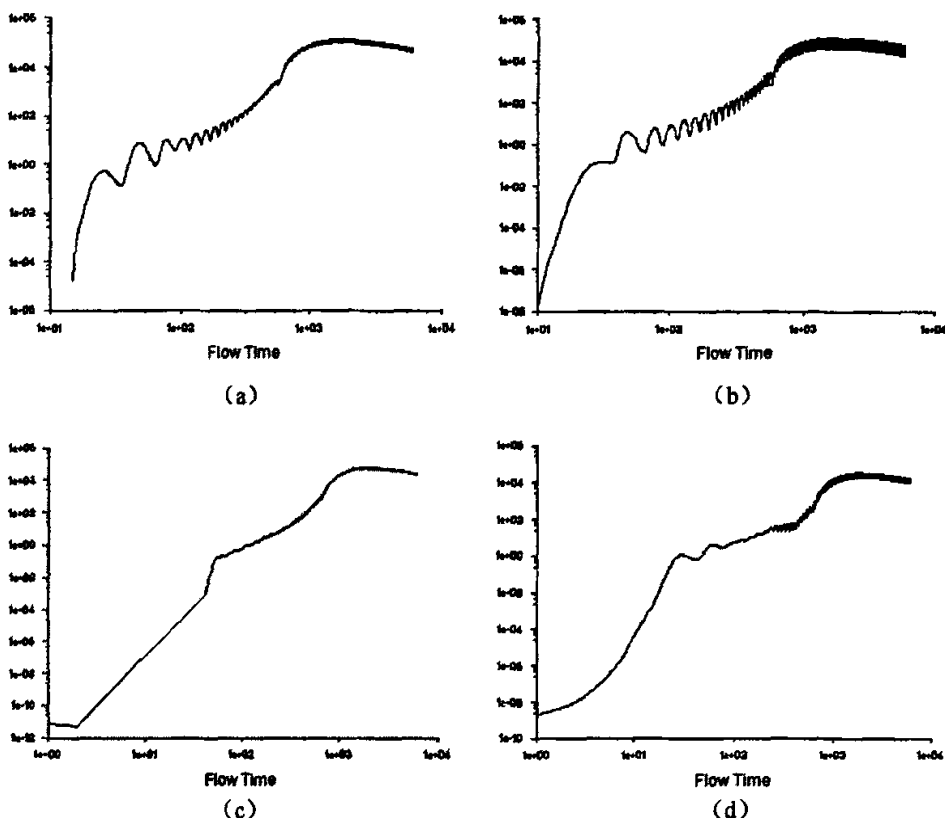


图 4-4 污染物浓度随时间变化平均值

(a) b 墙面 (b) c 墙面 (c) d 墙面 (d) e 墙面

(1) b、c 两墙面受的污染影响最严重, 墙面 e 受影响程度最小。由风场图

3-29 看出，由于该结构中也存在着两条建筑物高风速通道，所以污染源主要受推流迁移作用控制，沿风道扩散，墙面 b、c 正好处于下风向，受影响最大。而 d 墙面的污染物主要来自通过 c 墙面后的污染物，其中部分扩散至低风速涡旋区积累所致。e 墙污染物来自通过 b 墙面后的污染物中的一小部分，所以浓度最低。

(2) b、c、e 面均有浓度波动，d 面几乎无波动。这是因为风速场的钝体绕流引起的，如果风速通道与风向相平行的话，上下两面的波动情况应一致。

(3) 在实际情况测量时，由于是定时采样，这种波动情况可能测不出来，所以用数值模型来研究非稳态污染源的扩散情况对摸清污染物随时间的变化规律是有重要意义的。

3、不同时刻切断污染源后的污染物扩散规律

污染源在微生物生长的不同时期被隔离后的持续性影响是不同的，本文简单的揭示了几种时刻切断污染源后影响趋势。

(1) 假设当污染源在产生后 $1/2T$ 时被发现隔离为例，这后的变化如图 4-5 所示：

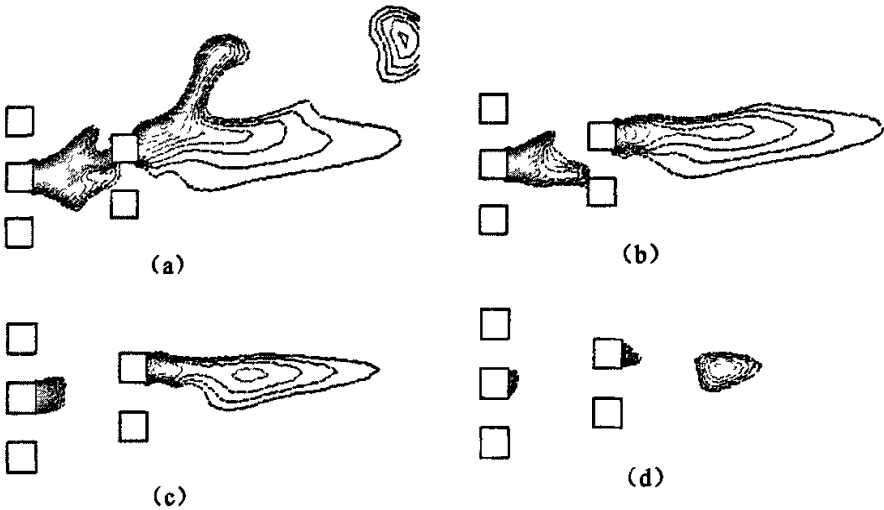


图 4-5 隔离污染源后残余污染物扩散浓度分布 (5m/s)

(a) $1/2T+1/120T$ (b) $1/2T+1/60T$ (c) $1/2T+3/120T$ (d) $1/2T+1/31T$

由图可以看出：

①当 $1/30T$ 后，污染物的浓度在全部范围内降到致病浓度以下。

②当污染源被切断时，积累在建筑物背风侧墙面 d、f 上的污染物则成为有一定影响力的新污染源头。数据证实，f 墙面上的浓度更大一些，且不易扩散，说明原始污染源被切断后，该处仍在一段时间内受到较大的影响。d 墙也出现类似现象，只是浓度比 f 小。当该处的微生物污染物最终扩散到致病浓度以下时，建筑区内各地点才安全。

(2) 在不同时刻隔离出原始污染源后至完全安全的作用时间如下图所示。

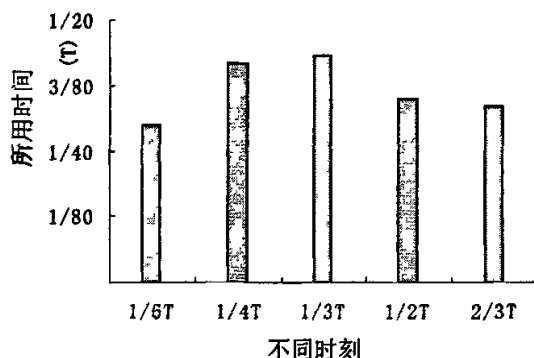


图 4-6 不同时刻隔离原始污染源后到全部扩散的时间

从图 4-6 可以看出：

①在不同时期隔离后至全部安全的时间与当时的微生物生长过程相关联，从图中可以看出，该做用时间也是类似微生物生长曲线变化的。所以当某处发现疫情时，可先判断一下其处于微生物生长的哪个阶段，在采取相应的预防措施。

②虽然在微生物污染物进入衰退期时对其进行隔离，原始污染源产生的微生物浓度能较快的扩散完全。但是，考虑到该疫情有可能已诱发了新的污染源，后果就更加严重了。因此，还是越早发现污染源、越早隔离越好。

③对于不同时刻多发性污染源的研究，在流行病学中用统计及随机数学模型作过研究，但是对于 FLUENT 来说，应该可以根据浓度及时间进行发病判断，从而建立不同时刻多发性污染源的模型，具体模式有待于进一步研究。

4.3 小结

本文将病毒群体动力学模型引入为非稳态污染源，带到污染物扩散方程中，研究其扩散变化规律，有一定的创新性。

近些年来，随着一些微生物引起的、可在空气中传播的疾病的出现，建立该类传染病的预警系统，已成为迫切需要。本文在前面研究的基础上，研究了非稳态微生物污染物对建筑小区的影响，发现了一些有用规律，这些都将为传染病的预警及小区结构的优化设计提供参考。

第五章 结论与展望

5.1 主要结论

本文确定了影响模型准确性的主要因素,并通过二维及三维数值模型研究了污染物在几种不同的建筑小区中的扩散规律,总结出一种高效数值模型优化方法,并首次将病毒群体动力学模型引入到空气质量非稳态污染扩散模型中来,针对特定小区结构研究了非稳态微生物污染源的扩散规律。本文的主要结论如下:

1、研究了以往模型中容易忽略的影响模拟结果准确性的关键性问题:

(1) 在二维街道峡谷模型中,发现边界条件 k 、 ε 的取值对结果有很大影响,为此,结合经验公式及风洞实验数据确定较为合理的 k 、 ε 的取值公式。

(2) 发现计算域的选取对计算结果的准确性和数值模拟的计算时间有重要影响,为此,本文结合风洞实验数据确定了二维情况垂直平面情况下数值模型的有效计算域,确定了影响模型计算准确性的主要因素,并设计了能正确计算街道峡谷模式的最小域模型。

(3) 在二维垂直及水平情况下比较了三种 k 、 ε 模型的计算效果,并结合理论分析,认为 RNG k - ε 模型的计算效果最好。

(4) 在二维街道峡谷模型中,比较了结构网格和非结构网格的计算效果,并结合理论及本文所涉及的模型特点,认为非结构网格更适用于本文模型。

2、本文通过二维及三维数值模型研究了一些理想结构的建筑小区中稳态点源污染物的扩散规律,总结了一种高效数值模型优化方法,并对其进行了验证。

(1) 以二维水平方向的建筑群为数值模拟的基本对象,研究了稳态点源污染物在单建筑、三种结构多建筑的小区间的扩散情况,并综合建筑物周围的风场进行分析,研究认为当污染源位于建筑物间的高风速通道更有利于其扩散,当污染物位于建筑物后面的涡旋区时,则易在建筑物表面形成累积。

(2) 用三维模型实现了三种结构多建筑小区污染物扩散的模拟,来验证二维计算规律的准确性,并得出了二维模型的适用性。

(3) 综合以上二维及三维的研究,本文总结出了一种建筑小区抗污染优化设计的快捷方法,即在某种优化和设计之前,先在二维情况下进行试算,找到适

用的条件及一些规律后, 再在三维情况下验证, 这样做可节省大量的研究时间。

3、设计了二维水平方向的九栋建筑小区模型, 并将其放在十字交叉路口的不同位置, 研究了两条相同浓度的稳态线源污染物对该小区的影响。

(1) 研究得出了线源污染物的扩散规律, 发现了不同位置的建筑小区中最易受线源污染的地方, 并在小区的三种位置中比较出最有利于污染物扩散的小区位置, 以上研究均为设计有利于线源扩散的建筑小区结构提供了依据。

(2) 在二维水平方向的线源研究中, 考虑了气象因素中风向对污染物在小区中扩散的影响作用, 发现当该九栋建筑小区位置与当地的主要风向成一定角度时, 更有利于街道线源污染物的扩散。

4、首次将病毒群体动力学模型引入到空气质量扩散模型中, 进行了非稳态微生物污染源扩散的模拟研究。

(1) 得出了微生物污染物在建筑小区中的扩散规律, 找到了不同时刻受影响最严重的建筑物, 并在不同时刻隔离原始污染源以观察污染物的变化情况, 发现了建筑物墙面累积的污染物对整个环境的持续影响作用, 为建立有害微生物扩散预警模型及小区结构的抗污染扩散设计提供了参考。

(2) 在关于病毒群体动力学非线性全微分方程组的研究中, 针对该动力学方程组的特点, 尝试了将拟牛顿法-与最小二乘相结合的方法来反求参数。并针对该方法的不足之处, 考虑到将计算机图像识别功能为之服务, 该方法尤其适合复杂情况的参数反求、曲线拟合问题。

5.2 展望

1、建筑物间污染物扩散的研究

建筑物间污染物扩散的模拟研究目前还处于不成熟阶段, 本文所研究的建筑物与其周围的污染物扩散的关系讨论只是其中的某些方面。要对其关系进行全面的研究, 还有很多工作要做, 例如:

(1) 对于地面凸凹不平、风向成规律性变化、风速为阵风形势(风谱)的情况都可以进行深入的研究。另外, 热作用对污染物湍流扩散规律的影响也是值得研究的。

(2) 对于不同粒径、不同密度的污染物扩散规律的研究。

(3) 各种不同形状的楼群之间的距离、楼群的结构与气象条件的关系的进一步研究。

(4) 本文研究了点源和线源对建筑群的影响, 同样面污染源对(如大面积的露天垃圾场污染物的挥发、受污染的池水中的有害气体的挥发等)对周围环境和建筑群的影响也可研究。

(5) 本文研究了稳态线源(机动车流动源污染)对建筑群的影响, 为更详尽的了解线源对建筑群的污染情况, 还可在研究中加入机动车流动源尾气污染模型——非稳态线源来进行计算。

(6) 非稳态点源对建筑物影响的研究也有很大的研究空间。

(7) 可以根据本文研究提出有利于污染物扩散的改进建议, 并通过数值模型来验证其正确性。如适当的加大靠街道处各建筑与街道的距离是否更有利于污染物的扩散, 到底距离多大合适, 对建筑小区的结构作适当的改进时, 是否应在容易形成低风速涡旋区处改变建筑物的位置等。

2、城市大气质量多尺度模型的建立

在城市大气质量控制的数值模拟中, 随着城市化进程的不断提高, 单一城市尺度下的气象和大气污染问题已不能满足城市发展需要, 必须建立多尺度模拟系统。该系统主要集中在以下三个尺度范围: 城市尺度(数十公里至数百公里水平范围, 几小时至数十小时)、城市小区尺度(数公里水平范围, 数小时)和建筑物尺度(数十米至数百米水平范围, 数十分钟)。利用整个系统可以研究由大到小、由粗到细的环境信息、掌握从城市及周边地区到城区到城市小区甚至街区内、建筑物间的污染特征及变化^[14, 15]。本文的研究属于建筑物尺度问题, 如果能将本文模型与其它两种尺度的模型结合起来, 将组成城市大气质量模型, 具有很好的应用前景。

3、可在空气中传播的致病性微生物预警系统的建立

随着近几年可在空气中传播的微生物引起的疫病出现, 使得该模型的建立成为目前研究的热点, 如欧洲口蹄疫爆发预警系统的研究、我国中科院的非典病毒预警系统等。本文引入病毒感染群体动力学模型机制的研究, 正是该系统的一部分, 该处的继续研究将为可在空气中传播的致病性微生物预警系统提供进一步的依据。

参考文献

- [1]Yu ITS,Li YG,Evidence of airborne transmission of SARS-Reply,New England Journal of Medicine,2004,351(6):611~611
- [2]A.Walton,A.Y.S.Cheng,W.C.Yeung,Large-eddy simulation of pollution dispersion in an urban street canyon-Part I :comparison with field data,Atmospheric Environment,2002,36:3601~3613
- [3]赵德清, 范静涛, 范静龙, CFD 方法在小区规划设计/高大空间建筑设计当中的应用, 建筑热能通风空调, 2003, (3): 20~21
- [4]蒋维楣, 苗世光, 刘红年等, 城市街区污染扩散的数值模拟与风洞实验的比较分析, 环境科学学报, 2003, 23(5): 652~656
- [5]Bernd M.Leitl,P.Kastner-Klein,etl,Concentration and flow distributions in the vicinity of U-shaped buildings: Wind-tunnel and computational date,Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics,1997,67&68:745~755
- [6]《北京城市规划建设与气象条件及大气污染关系研究》课题组, 城市规划与大气环境, 北京: 气象出版社, 2004.50~90
- [7]Dewulf J,Laevens H,Koenen F,Airborne transmission of classical swine fever virus under experimental conditions,Veterinary record,2000,147(26):735~738
- [8]马知恩, 周义仓, 传染病动力学的数学建模与研究, 北京: 科学出版社, 2004.30~60
- [9]谢天恩, 普通病毒学, 北京: 科学出版社, 2002.56~70
- [10]于玺华, 现代空气微生物学, 北京: 人民军医出版社, 2002.105~120
- [11]Sørensen J H,Mackay D K J,An integrated model to predict the atmospheric spread of foot-and-mouth disease virus,Epidemiol.Infect.,2000,124:577~590
- [12]Donaldson A I,Alexandersen S,Predicting the spread of foot and mouth disease by airborne virus,Rev.sci.tech.off.int.Epiz.,2002,21(3):569~575
- [13]Mikkelsen T,Alexandersen S,etl,Investigation of airborne foot-and-mouth disease virus transmission during low-wind conditions in the early phase of the UK2001 epidemic,Atmos.Chem.Phys.,2003,3:2101~2110
- [14]Yu its,Li YG,Wong TW,etl,Evidence of airborne transmission of the severe acute respiratory syndrome virus,New England journal of medicine,2004,350(17): 1731~1739
- [15]李万平, 计算流体力学, 武汉: 华中科技大学出版社, 2004.9~63
- [16]刘导治, 计算流体力学基础, 北京: 北京航空航天大学出版社, 1989.30~50

- [17]Fluent inc.,FLUENT User's Guide,Fluent Inc.,2003
- [18]韩占忠,王敬,兰小平,FLUENT 流体工程仿真计算实力与应用,北京:北京理工大学出版社,2004.10~30
- [19]Fluent int.,FLUENT User Defined Function Manual,Fluent Inc.,2003
- [20]Fluent inc.,GAMBIT Modeling Guide,Fluent Inc.,2003
- [21]王福军,计算流体动力学分析——CFD 软件原理与应用,北京:清华大学出版社,2004.1~23
- [22]陶文铨,数值传热学,西安:西安交通大学出版社,1988.257~300
- [23]蒋维楣,空气污染气象学,江苏:南京大学出版社,2003.35~45
- [24]赵鸣,苗曼倩,大气边界层,北京:气象出版社,1992.1~15
- [25]郑彤,陈春云,环境系统数学模型,北京:化学工业出版社,2003.156~189
- [26]程声通,陈毓龄,环境系统分析,北京:高等教育出版社,1996.27~52
- [27]余常昭,环境流体力学导论,北京:清华大学出版社,1992.50~72
- [28]谷清,李云生,大气环境模式计算方法,北京:气象出版社,2002.109~050
- [29]羌宁,城市空气质量管理与控制,北京:科学出版社,2003.40~43
- [30]Shuzo,Murakami,Akashi mochida,3-D numerical simulation of airflow around a cubic model by means of the $k-\epsilon$ model,Journal of wind engineering and industrial aerodynamics, 1988, 31: 283~303
- [31]M.Tutar,G.Oguz,Large eddy simulation of wind flow around parallel buildings with varying configurations,Fluid Dynamics Research,2002,31(5&6):289~315
- [32]周光炯,严宗毅,许世雄等,流体力学,北京:高等教育出版社,2000.106~160
- [33]苏铭德,黄素逸,计算流体力学基础,北京:清华大学出版社,1997.20~50
- [34]H.K.Versteeg,W.Malalasekera,An introduction to computational fluid dynamics:the finite volume method,Wiley,New York,1995
- [35]C.J.Chen,S.Y.Jaw,Fundamentals of turbulence modeling,Taylor&Francis, Washington,1998
- [36]B.E.Launder,D.B.Spalding,Lectures in mathematical models of turbulence,Academic press,London,1972
- [37]T.L.Chan,G.Dong,C.W.Leung,etl,Validation of a two-dimensional pollutant dispersion model in an isolated street canyon,Atmospheric Environment,2002,36:861~872
- [38]T.H.Shih,W.W.Liou,A.Shabbir,etl,A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows,Comput Fluids,1995,24(3):227~238
- [39]A.Walton,A.Y.S.Cheng,Large-eddy simulation of pollution dispersion in an urban street canyon-Part II :idealized canyon simulation,Atmospheric environment,2002,36:3615~3627
- [40]Huang huaxiong,Prosperetti A,Effect of grid orthogonality on the solution accuracy of the

- two-dimensional convection-diffusion equation, *Numer Heat Transfer, Part B*, 1994, 26: 1~20
- [41] Fletcher C A J, *Computational techniques for fluids dynamics*, vol. II: specific techniques for different flow categories, 2nd ed, Berlin: Springer-Verlag, 1991. 53: 351
- [42] 丁思统, 余翔华, 吴承祯, Verhulst 模型及其应用, 江西: 江西林业科技, 1992, 38~40
- [43] 薛付忠, 王洁贞, 马希兰, 疾病暴发流行过程的数学模拟及其应用的研究, 数理医药学杂志, 1999, 12: 4~6
- [44] 王开发, 邱志鹏, 病毒感染群体动力学模型分析, 系统科学与数学, 2003, 23(4): 433~443
- [45] Davide verotta, Franziska schaedeli, Non-linear dynamics models characterizing long-term virological data from AIDS clinical trials, *Mathematical Biosciences*, 2002, 176: 163~183
- [46] Roland R. Regoes, Dominik wodarz, Martin A. Nowak, Virus dynamics: the effect of target cell limitation and immune responses on virus evolution, *J. theor. Biol.*, 1998, 191: 451~462
- [47] 李光熙, 陶文铨, 非典型肺炎病毒在空气中传播过程的初步数值模拟, 西安交通大学学报, 2003, 37(7): 764~766
- [48] J. H. Sørensen, C. Ø. Jensen, T. Mikkelsen, et al, Modelling the atmospheric dispersion of foot-and-mouth disease virus for emergency preparedness, *Phys. Chem. Earth*, 2001, 26(2): 93~97
- [49] Robert N. Meroney, Michel Pavageau, Stilianos Rafailidis, Study of line source characteristics for 2-D physical modelling of pollutant dispersion in street canyons, *Journal of wind engineering and industrial aerodynamics*, 1996, 62: 37~56
- [50] Robert N. meroney, Bernd M. Leitl, Stilianos Rafailidis, Wind-tunnel and numerical modeling of flow and dispersion about several building shapes, *Journal of wind engineering and industrial aerodynamics*, 1999, 81: 333~345
- [51] M. Tutar, G. Oguz, Computational modeling of wind flow around a group of building, *International journal of computational fluid dynamics*, 2004, 18(8): 651~670
- [52] Y. Gao, W. K. Chow, Numerical studies on air flow around a cube, *Journal of wind engineering and industrial aerodynamics*, 2005, 93: 115~135
- [53] 王卫国, 徐敏, 蒋维楣, 建筑物附近气流特征及湍流扩散的模拟实验, 空气动力学学报, 1999, 17(1): 87~92
- [54] Joseph V. Spadaro, Ari Rabl, Damage costs due to automotive air pollution and the influence of street canyons, *Atmospheric Environment*, 2001, 35: 4763~4775
- [55] Sangsan Lee, Unsteady aerodynamic force prediction on a square cylinder using $k-\epsilon$ turbulence models, *Journal of wind engineering and industrial aerodynamics*, 1997, 67&68: 79~90
- [56] 王远成, 吴文权, 基于 RNG $k-\epsilon$ 湍流模型钝体绕流的数值模拟, 上海理工大学学报, 2004, 26: 519~523
- [57] Fue Sang Lien, Eugene Yee, John D. Wilson, Numerical modelling of the turbulent flow

- developing within and over a 3-D building array,part II :A mathematical foundation for a distributed drag force approach,Boundary-layer Meteorology,2005, 114:245~285
- [58]M.Middelboe,Bacterial growth rate and marine virus-host dynamics,Microbial Ecology,2000,10:114~124
- [59]闵涛,周孝德,河流水质纵向弥散系数反问题的迭代算法,水动力学研究与进展,2003, 18 (5): 547~552
- [60]王福明,应用数值计算方法,北京,科学出版社,1992.150~205
- [61]王新洲,非线性模型参数估计理论与应用,武汉,武汉大学出版社,2002.53~78
- [62]张世英李忠民,袁学民,经济计量学教程,天津,天津大学出版社,2002.36~52
- [63]王新洲,刘丁酉,黄海兰,谱修正迭代结果的协因数矩阵,武汉大学学报,2003, 028(004): 429~431
- [64]Wu hulin,Estimation of hiv dynamic parameters,Statistics in medicine,1998, 17:2463~2485
- [65]曾绍标,熊洪允,毛云英,应用数学基础(下),天津:天津大学出版社,2003.38~80

发表论文和科研情况说明

发表的论文:

尤学一, 李莉, “建筑群中点源污染扩散的数值模拟”, 《环境科学研究》, 已录用

致 谢

本论文是在我的导师尤学一教授的悉心指导下完成的。在三年的学习和科研中，我强烈的感受到尤老师渊博的学识、严谨的治学态度、科学的工作方法和孜孜不倦的创新精神，这些都将对我今后的工作和生活产生重大影响。尤老师在我课题研究的指导中付出了大量的心血，对我的数值模拟实验给予了极大的支持，在此我要向尤老师表示深深的敬意。

同时，我要感谢柴老师、解老师在数学上给我的指导，感谢杨老师对我研究生生活的关心和照顾。

此外，我还要感谢师姐郑湘君、师兄陈小明对我研究工作的帮助，感谢我的好朋友李丹、平措、于涛、廖静、吴迷芳、王科理、殷传斌给我生活中带来的快乐，也感谢师弟肖厚蓬、李胜华，师妹黄道君、刘伟、郑静茹给我们办公室带来的良好氛围。

感谢永远支持爱护我的父母和家人，感谢我的男友，还有所有帮助过我的老师们、同学们和朋友们。