大气污染的最优调控与污染源反演问题II: 正负区分判定迭代求优法

曾庆存[†], 吴琳^{*}, 费可测

中国科学院大气物理研究所, 北京 100029

* 通讯作者, E-mail: wulin@mail.iap.ac.cn

† 通讯作者, E-mail: zqc@mail.iap.ac.cn

收稿日期: 2018-12-27; 收修改稿日期: 2019-11-12; 接受日期: 2019-12-18; 网络版发表日期: 2020-04-01

国家重点研发计划项目(编号: 2016YFC0209000)和国家自然科学基金项目(批准号: 41630530、41877316)资助

摘要 已有研究建议用非完整伴随算子方法先求出最优的总源减排方案 $\mathbf{S}'$, 本文则研究由 $\mathbf{S}'$ 继而求人为源的优化减排 $\mathbf{S}'_a$ 的问题. 由于化学反应生成源 $\mathbf{S}_c$ 为污染物浓度 $\mathbf{p}$ 的复杂泛函, 本文提出一种“正负区分判定迭代求优法”, 由 $\mathbf{S}'$ 求 $\mathbf{S}'_a$, 证明其收敛.

关键词 大气污染, 人为排放源, 化学反应生成源, 优化调控, 迭代优化, 正负区分判定

1 污染预报和优化减排的数学问题

曾庆存和吴琳(2018)已详述了大气污染预报、优化减排和动态反演源的数学问题, 引入非完整伴随算子, 并提出了求解相应问题的数学方法, 本篇详述由总源(自然源、人为排放源和大气内部由化学反应生成的内源之和)求出人为排放源的方法. 为便于读者沟通这两篇的联系, 本节再简短复述污染预报、优化减排的数学问题的提法.

1.1 污染预报问题

用污染预报问题(方程加初边值条件)求出污染物浓度 $\mathbf{p}$,

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} = A(\mathbf{p}) + (\mathbf{S}_n + \mathbf{S}_a + \mathbf{S}_c), \\ \Lambda(\mathbf{p})|_{\partial\Omega} = 0, \\ \mathbf{p}|_{t=0} = \mathbf{p}_{00}. \end{cases} \quad (1)$$

式(1)为一般形式的大气污染扩散传输方程及其初边值条件, 式中 A 是表示平流扩散和沉降的算子, Λ 是表示边界条件的算子, A 和 Λ 只依赖于气象场而与 $\mathbf{p}$ 无关, $\mathbf{S}_n$ 、 $\mathbf{S}_a$ 和 $\mathbf{S}_c$ 分别是自然排放源、人为排放源和化学反应生成源. 即式(1)为一类偏微分方程组的初边值问题, 可数值求解, 例如Tangermann(1978)、Sanin和Montero(2007)、Wang等(2013), 是空气质量模式中的常用方法(Byun和Schere, 2006).

设 $\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{S}_a$ 已知, 记为 $\mathbf{S}_n^{(0)}$ 和 $\mathbf{S}_a^{(0)}$, 求解预报问题式(1)

中文引用格式: 曾庆存, 吴琳, 费可测. 2020. 大气污染的最优调控与污染源反演问题II: 正负区分判定迭代求优法. 中国科学: 地球科学, 50: 688–692, doi: 10.1360/N072018-00355

英文引用格式: Zeng Q, Wu L, Fei K. 2020. Optimal reduction of anthropogenic emissions for air pollution control and the retrieval of emission source from observed pollutants II: Iterative optimization using a positive-negative discriminant. Science China Earth Sciences, 63: 726–730, <https://doi.org/10.1007/s11430-018-9568-5>

所得的解记为 ρ_0 . 此外, 化学反应生成源 S_c 直接依赖于 ρ , 是 ρ 的复杂泛函, 从而也可求得相应的化学反应生成源为 $S_c^{(0)}$. 将总源记为 $S^{(0)} = S_n^{(0)} + S_a^{(0)} + S_c^{(0)}$.

1.2 优化减排问题

如时空范围 Ωt 内的空气质量不达标, 要求人为排放源减为 $S_a^{(0)} - S'_a$, S'_a 待求. S_a 变化一般也使得 S_c 发生变化, 记此变化为 $S_c^{(1)} = S_c^{(0)} - S'_c$, 而 S_n 不受人为源减排影响, 即 S_n 保持为 $S_n^{(0)}$.

$S_a^{(0)}$ 减为 $S_a^{(0)} - S'$, 使 ρ_0 减为 $\rho_0 - \rho'$, 使得 Ωt 内的污染物总浓度小于目标值 D , 即满足:

$$\begin{aligned} \{\rho_0 - \rho'\} &\equiv (\rho_0 - \rho', \mathbf{W}) \\ &\equiv \iint_{\Omega t} (\rho_0 - \rho') \cdot \mathbf{W} d\Omega dt \leq D, \end{aligned} \quad (2)$$

式中, $\mathbf{W}$ 为对浓度 ρ 的权重, $\mathbf{W}$ 、 ρ 和 ρ' 都是矢量, 记 $\mathbf{W}$ 和 ρ' 的内积为 $\{\rho'\}$, 则有

$$\begin{aligned} \{\rho'\} &\equiv (\rho', \mathbf{W}) \\ &\equiv \iint_{\Omega t} \rho' \cdot \mathbf{W} d\Omega dt \geq (\rho_0, \mathbf{W}) - D = D', D' > 0, \end{aligned} \quad (3)$$

式中, 记号 $\{f\}$ 为矢量 f 的加权数量积, $f \cdot g$ 为两矢量的数量积, 其积分就是内积, 记作 (f, g) . 相似地引入记号

$$\{S'_a\} \equiv (E, S'_a) \equiv \iint_{\Omega t} E \cdot S'_a d\Omega dt, \quad (4)$$

$$\{S'\} \equiv (E, S') \equiv \iint_{\Omega t} E \cdot S' d\Omega dt, \quad (5)$$

式中, E 为单位减排的经济损失, 同曾庆存和吴琳(2018). 注意: 对源 S_a 各分量的权重我们取为相同的值 E , 即 E 只是空间 Ω 的点上和时间 t 的函数.

ρ 、 S_n 、 S_a 、 S_c 、 $\mathbf{W}$ 、 E 等都是矢量, 但维数不同. ρ 是式(1)所计算的各种化学物(包括可能的化学元素的分子态甚至原子态)所张成的空间, 记作空间 P . S_n 、 S_a 和 S_c 所对应的化学物种类只是其中的不同子空间, 不妨将与 S_n 、 S_a 和 S_c 对应的空间记为 P_n 、 P_a 和 P_c . 它们之间有一部分可能重迭, 例如, $\rho_k \sim \rho_l$ 一段就是 P_a 和 P_c 的重迭部分(详见图1). E 和 S_a 为同一个子空间, 其外则将 E 的值取为0, 必须指出, 我们可以视上述 S 和 E 等都定义在整个 ρ 空间上, 例如对 S_a 来说, 子空间 P_a 以外,

图1 化学物 ρ 空间与污染物 ρ_p 子空间及 S_n 、 S_a 和 S_c 子空间示意图

S_a 分量取为0即可.

要求优化减排, 原本的提法是在满足空气质量的要求(即式(3))下, 减排的经济损失最小(朱江和曾庆存, 2002; 刘峰等, 2003; 方叠等, 2013), 即

$$\{S'_a\} = \min, \quad (6)$$

式(5)是曾庆存和吴琳(2018)中引入的一个辅助量, 即把实际的优化减排要求用下式代替,

$$\{S'\} = \min. \quad (7)$$

这样做是由于式(3)和(7)一起只需求解一个线性的伴随问题, 减少求解难度和计算量. 于是问题转化为如何由满足式(7)的 S' 求得满足式(6)的 S'_a , 注意到由 S_a 减排导致总源项 S' 的减少为 $S' = S'_a + S'_c$, 这就间接牵涉到 S'_c 的计算(注: 本文的4.2节介绍化学源 S_c 的通则). 本文建议的方法就包含有求 S'_c 的部分, 并由 S' 求出 S'_a .

1.3 优化减排问题的求解

满足式(3)和(7)的 S' 可由求解非完整伴随问题求得, 见曾庆存和吴琳(2018). 简言之, 就是用原来关于 ρ' 的问题:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho'}{\partial t} = A(\rho') + S', \\ \Lambda(\rho')|_{\partial\Omega} = 0, \\ \rho'|_{t=0} = 0, \end{cases} \quad (8)$$

就其线性算子部分构建如下的伴随算子, 相应的数学问题就是求出其解 ρ^* , 使满足:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{E}\mathbf{p}^*}{\partial t} = -A^*(\mathbf{E}\mathbf{p}^*) - a\mathbf{W}, \\ \Lambda^*(\mathbf{E}\mathbf{p}^*)|_{\partial\Omega} = 0, \\ \mathbf{E}\mathbf{p}^*|_{t=T} = 0, \end{cases} \quad (9)$$

可证: 若 $\mathbf{S}'$ 各分量 ≥ 0 , 则 $\mathbf{p}'$ 各分量 ≥ 0 , 简记为: 若 $\mathbf{S}' \geq 0$, 则 $\mathbf{p}' \geq 0$; 相似地, 若 $a\mathbf{W}$ 各分量 ≥ 0 , 则 $\mathbf{E}\mathbf{p}^*$ 各分量 ≥ 0 . 曾庆存和吴琳(2018)已给出求解此非完整伴随问题的方法, 建立起 $\mathbf{S}'$ 和 $\mathbf{p}^*$ 的联系, 并求得分别满足式(3)和(7)的 $\mathbf{p}'$ 和 $\mathbf{S}'$. 本文的任务是由 $\mathbf{S}'$ 求得满足式(3)的 $\mathbf{S}'_a$.

2 “正负区分判定迭代法”——由 $\mathbf{S}'$ 求出人为源优化减排 $\mathbf{S}'_a$ 的一种方法

一般来说, 自然源 $\mathbf{S}_n$ 只依赖于气象和环境条件, 不随人为排放而变, 而在大气内部由化学反应生成的源 $\mathbf{S}_c$ 则通过 $\mathbf{p}$ 间接依赖于 $\mathbf{S}_a$, 因此 $\mathbf{S}_c$ 和 $\mathbf{S}$ 都可看作是 $\mathbf{S}_a$ 的复杂泛函, 于是有

$$\mathbf{S}' = \mathbf{S}'_a + \mathbf{S}'_c = F(\mathbf{S}'_a). \quad (10)$$

在已知 $\mathbf{S}'$ 情况下, 为了求解泛函方程式(10), 我们建议用“正负区分判定迭代法”, 如下:

第一步: 不妨取

$$\mathbf{S}'_a = \begin{cases} \alpha \mathbf{S}', & \text{对于 } \mathbf{S}'_a^{(0)} \text{ 中大于0的分量,} \\ 0, & \text{其他分量,} \end{cases} \quad (11)$$

式中, α 为一系数, 满足 $0 < \alpha < 1$. 并引入记号 $\alpha_M^{(0)}$ 和 $\alpha_m^{(0)}$, 今取 $\alpha_M^{(0)} = 1$, $\alpha_m^{(0)} = 0$. 取猜值 $\alpha^{(1)}$ 和相应的 $\mathbf{S}'_a^{(1)}$, 如下:

$$\alpha_m^{(0)} < \alpha^{(1)} < \alpha_M^{(0)}. \quad (12)$$

$$\mathbf{S}'_a^{(1)} = \begin{cases} \alpha^{(1)} \mathbf{S}', & \text{对于 } \mathbf{S}'_a^{(0)} \text{ 中大于0的分量,} \\ 0, & \text{其他分量,} \end{cases} \quad (13)$$

其中 $\alpha^{(1)}$ 可灵活选择, 只须满足式(12)即可. 例如可取 $\alpha^{(1)} = 0.5$. 将

$$\mathbf{S}_a^{(1)} \equiv \mathbf{S}_a^{(0)} - \mathbf{S}'_a^{(1)}, \quad (14)$$

代入式(1), 算得的 $\mathbf{p}$ 记为 $\mathbf{p}^{(1)}$. 于是可算以下各量:

$$\mathbf{p}'^{(1)} \equiv \mathbf{p}^{(0)} - \mathbf{p}^{(1)}, \quad (15)$$

$$\Delta^{(1)} \equiv \left\{ \mathbf{p}'^{(1)} \right\} - D'. \quad (16)$$

第二步: 检查 $\Delta^{(1)}$ 的符号

若 $\Delta^{(1)} = 0$, 则 $\mathbf{S}'_a^{(1)} = \alpha^{(1)} \mathbf{S}'$ 就是满足要求的减排量, 否则分两种情况. 第一种是 $\Delta^{(1)} > 0$, 这说明减排量过大, α 要减少. 取

$$\begin{cases} \alpha_M^{(1)} = \min(\alpha_M^{(0)}, \alpha^{(1)}) = \alpha^{(1)}, \\ \alpha_m^{(1)} = \min(\alpha^{(1)}, \alpha_m^{(0)}) = \alpha_m^{(0)}. \end{cases} \quad (17)$$

第二种是 $\Delta^{(1)} < 0$, 这说明减排量过小, α 要增加. 取

$$\begin{cases} \alpha_M^{(1)} = \max(\alpha_M^{(0)}, \alpha^{(1)}) = \alpha_M^{(0)}, \\ \alpha_m^{(1)} = \max(\alpha^{(1)}, \alpha_m^{(0)}) = \alpha^{(1)}. \end{cases} \quad (18)$$

对两种情况, 取下一个猜值 $\alpha^{(2)}$ 为

$$\alpha_m^{(1)} < \alpha^{(2)} < \alpha_M^{(1)}, \quad (19)$$

于是有

$$\mathbf{S}'_a^{(2)} = \begin{cases} \alpha^{(2)} \mathbf{S}', & \text{对于 } \mathbf{S}'_a^{(0)} \text{ 中大于0的分量,} \\ 0, & \text{其他分量,} \end{cases} \quad (20)$$

$$\mathbf{S}_a^{(2)} = \mathbf{S}_a^{(0)} - \mathbf{S}'_a^{(2)}. \quad (21)$$

将 $\mathbf{S}_a^{(2)}$ 取代式(1)中的 $\mathbf{S}_a^{(0)}$, 算得的 $\mathbf{p}$ 记作 $\mathbf{p}^{(2)}$, 而记

$$\mathbf{p}'^{(2)} \equiv \mathbf{p}^{(0)} - \mathbf{p}^{(2)}, \quad (22)$$

$$\Delta^{(2)} \equiv \left\{ \mathbf{p}'^{(2)} \right\} - D'. \quad (23)$$

检查 $\Delta^{(2)}$ 的符号, 同样分三种情况: $\Delta^{(2)} = 0$ 、 $\Delta^{(2)} > 0$ 和 $\Delta^{(2)} < 0$. 于是下一个 α (即 $\alpha^{(3)}$)的取值区间则根据 $\Delta^{(2)}$ 的符号, 分别参照式(17)和(18)作出判定.

总结起来, 对 $v=1, 2, 3, \dots$, 有统一的迭代规则如下:

$$\alpha_m^{(v-1)} < \alpha^{(v)} < \alpha_M^{(v-1)}, \quad (24)$$

$$\mathbf{S}'_a^{(v)} = \begin{cases} \alpha^{(v)} \mathbf{S}', & \text{对于 } \mathbf{S}'_a^{(0)} \text{ 中大于0的分量,} \\ 0, & \text{其他分量,} \end{cases} \quad (25)$$

$$\mathbf{S}_a^{(v)} = \mathbf{S}_a^{(0)} - \mathbf{S}'_a^{(v)}, \quad (26)$$

将 $\mathbf{S}_a^{(v)}$ 取代 $\mathbf{S}_a^{(0)}$, 由式(1)求出相应的 $\mathbf{p}^{(v)}$, 再计算 $\mathbf{p}'^{(v)}$ 和 $\Delta^{(v)}$,

$$\mathbf{p}^{(v)} \equiv \mathbf{p}^{(0)} - \mathbf{p}^{(v)}, \quad (27)$$

$$\Delta^{(v)} \equiv \left\{ \mathbf{p}^{(v)} \right\} - D', \quad (28)$$

而且有

$$\begin{cases} \alpha_M^{(v)} = \min(\alpha_M^{(v-1)}, \alpha^{(v)}) = \alpha^{(v)}, \\ \alpha_m^{(v)} = \min(\alpha^{(v)}, \alpha_m^{(v-1)}) = \alpha_m^{(v-1)}, \end{cases} \quad \Delta^{(v)} > 0, \quad (29)$$

$$\begin{cases} \alpha_M^{(v)} = \max(\alpha_M^{(v-1)}, \alpha^{(v)}) = \alpha_M^{(v-1)}, \\ \alpha_m^{(v)} = \max(\alpha^{(v)}, \alpha_m^{(v-1)}) = \alpha^{(v)}, \end{cases} \quad \Delta^{(v)} < 0, \quad (30)$$

其中, $\alpha_m^{(0)} = 0, \alpha_M^{(0)} = 1$.

如此, $\alpha^{(v)}$ 所在的区间 $(\alpha_m^{(v)}, \alpha_M^{(v)})$ 的长度 $\alpha_M^{(v)} - \alpha_m^{(v)}$ 是一个单调减小的序列, 于是 $\alpha^{(v)}$ 收敛到极限值 $\alpha^{(\infty)}$, $\mathbf{S}^{(v)}$ 收敛到 $\mathbf{S}_a^{(\infty)}$, 且 $\mathbf{p}^{(\infty)}$ 满足式(3), 故 $\mathbf{S}_a^{(\infty)}$ 就是优化减排方案.

3 讨论

在第2节中, 我们提出了一种求解优化减排的数学算法. 本优化减排问题的解也可能不唯一, 但所求得的解是满足要求的, 从而可用. 将减排量写成 $\alpha \mathbf{S}_a$, 就有 $0 \leq \alpha \leq 1$. $\alpha = 1$ 就是全部停工, $\alpha = 0$ 就是保持全面开工而不减排. 实际应用中, 通常是按片分区域和分时间段定出和执行减排任务, 例如, 对于京津冀地区作二天规划, 大体分三个区域、四个时段(二昼、二夜), 这样有 $3 \times 4 = 12$ 个待求的减排系数. 一般地, 取 J 个区域, $j = 1, 2, \dots, J$; N 个时间段, $n = 1, 2, \dots, N$, 就须求 $N \times J$ 个减排系数. 将相应的减排系数记为 $\alpha_{j,n}$, j 表示区域顺序, n 表示时间段顺序, 且将 Ωt 分区段, 记相应区段为 $(\Omega t)_{j,n}$, 以及将相应于 $(\Omega t)_{j,n}$ 的内积 $\{\mathbf{S}_a\}$ 记为 $\{\mathbf{S}_a'\}_{j,n}$, 于是在第2节中求得的 $\mathbf{S}_a' = \alpha \mathbf{S}_a^{(0)}$ 基础上, 可按下式

$$F(\alpha_{j,n}) \equiv \left[\sum_{j,n} \alpha_{j,n} \{\mathbf{S}_a^{(0)}\}_{j,n} - \{\mathbf{S}_a'\}_{j,n} \right]^2 = \min, \quad (31)$$

求出优化的减排系数 $\alpha_{j,n}$, 即为在 $0 \leq \alpha_{j,n} \leq 1$ 的约束条件下求最小值的问题, 这是个代数计算问题.

4 说明

4.1 化学物 $\mathbf{p}$ 空间与污染物 $\mathbf{p}_p$ 子空间及 $\mathbf{S}_n, \mathbf{S}_a$ 和 $\mathbf{S}_c$ 子空间

本文为了行文简洁, 采用抽象集总的数学表达形式, 特作以下解释.

为叙述方便起见, 我们将所有参加方程组 $\partial \mathbf{p} / \partial t$ (式(1)) 的化合物(包括可能以化学元素分子态或原子态者)记作矢量 $\mathbf{p} = (\rho_1, \dots, \rho_i, \dots, \rho_q)$, 每一种化合物 ρ_i 就是此 q 维空间矢量 $\mathbf{p}$ 的一个分量. 有以下几点说明:

(1) 排放源分量中只有自然源 $\mathbf{S}_n$, 而无人为排放源 $\mathbf{S}_a$ 和化学反应生成源 $\mathbf{S}_c$ (即 $\mathbf{S}_a = \mathbf{0}$ 和 $\mathbf{S}_c = \mathbf{0}$) 时, 记为

$$\mathbf{S}_{n*} = ((S_n)_1, (S_n)_2, \dots, (S_n)_{j-1}), (S_n)_i \neq 0.$$

(2) 有人为源的记为 $\mathbf{S}_a = ((S_a)_1, (S_a)_{j+1}, \dots, (S_a)_l)$, $l \leq q$. 注: 在 $k \leq i \leq l$ 区间, 可有个别 $(S_a)_i = 0$, 参见图1.

(3) 有化学反应(生成或消耗)的, 其生成源记为 $\mathbf{S}_c = ((S_c)_k, (S_c)_{k+1}, \dots, (S_c)_q)$, $k \geq j$, 如果化学反应造成消耗的, 其相应的 $\mathbf{S}_c$ 分量为负.

(4) $\mathbf{S}_c$ 与 $\mathbf{S}_a$ 有紧密关系的区间(不妨称为 $\mathbf{P}_A$ 和 $\mathbf{P}_C$ 相交子空间)记为 $k \leq i \leq l$ (详见图1).

(5) 既有 $\mathbf{S}_n$, 又有 $\mathbf{S}_a$ 和 $\mathbf{S}_c$ 的相应分量不为0的自然排放源记为 $\mathbf{S}_{n**} = ((S_n)_j, (S_n)_{j+1}, \dots, (S_n)_{m'})$, $j' \geq k, m \leq q$.

(6) 对人类社会和经济有影响的(真正的污染物)记为 $\mathbf{p}_p = (\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_m)$, $l < m < q$. 因 $\mathbf{W}$ 只与 $\mathbf{p}_p$ 相关, 故 $\mathbf{W}$ 和 $\mathbf{W} \cdot \mathbf{p}$ 只定义在 $\mathbf{p}_p$ 的子空间上.

(7) $\mathbf{E}$ 只定义在 $\mathbf{S}_a$ 的子空间上, 故 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{S}_a$ 和 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{S}$ 亦只定义在 $\mathbf{S}_a$ 的子空间上; 而 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{S}_c$ 则只定义在 $\mathbf{S}_a$ 和 $\mathbf{S}_c$ 相交的子空间上, 即 $j \leq i \leq l$; 在这些子空间以外, 取 $\mathbf{E} = \mathbf{0}$.

(8) 子空间 $(\rho_{m'+1}, \dots, \rho_q)$ 是只有 $\mathbf{S}_c$ 而无 $\mathbf{S}_a$ 和 $\mathbf{S}_n$ 分量者, 取 $\mathbf{E} = \mathbf{0}$. 如图1.

4.2 关于化学反应方程和 $\mathbf{S}_c$ 的通则

在大气中, 除了常定成分外, 还有许多可变的成分, 对人类有危害的称为污染物, 即图1中的 $\mathbf{p}_p$ 空间, 再加上本身不是污染物但与污染物有互相作用的化学物质(包括以分子态、原子态、电离态和硝酸根、硫酸根之类)就组成图1中的化学物 $\mathbf{p}$ 空间. $\mathbf{p}$ 的每一分量(比

如说 ρ_i) 在大气中受气象条件的物质平流输送、扩散和沉降过程, 还有一些则在大气中内部因发生化学反应过程而增消, 我们称这增消率为“化学源” S_c ; 此外, 还有自然界形成和人为排放输入到大气的, 我们分别记之为自然源 S_n 和人为源 S_a . 于是总源就是 $S = S_n + S_a + S_c$. S_n 和 S_a 本身是外界输入大气的外源, 它们既可以是直接危害人类活动的污染物, 也可以是“前体物”, 即它进入大气中后要经过在大气中发生的化学反应过程才形成污染物, 同时也消耗着这些“前体物”(化学反应对它来说是“汇”, 负“源”). 自然源和人为源中也包括有“催化剂”, 即促进化学反应, 但自身不增不减. 除了“催化剂”外, 所有上述这些物质种类都随空间变化和随时间演变, 对它们都应该列出演变过程方程. 由此可知 $\mathbf{p}$ 是一个相当多分量的高维矢量, 有些可能对人类并无危害, 但为简单计, 我们这里统称这些方程为大气污染物动力学方程. S_n , S_a , S_c 的维数可能比 $\mathbf{p}$ 要小, 不过形式上可以一视同仁, 采用同样的维数, 只是有许多分量为零. 于是对分量 ρ_i , 有

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla \rho_i + \nabla \cdot (K \cdot \nabla \rho_i) + D(\rho_i) + S_{ni} + S_{ai} + S_{ci}, \quad (32)$$

其中 S_{ci} 是其参加所有化学反应过程而导致的生成率总和. 无论化学反应如何多样和复杂, 从理论上说, 都可用公式表达出来, S_{ci} 是可清楚计算出来的. 如果理论

上尚不清楚, 即只好用半经验半理论的所谓参数化公式来表达, 其中的常数甚至必须通过尽可能多的观测资料“反演”出来, 这将在以后讨论.

参考文献

- 刘峰, 胡非, 王锸一. 2003. 用伴随方程研究空气污染的优化控制. 环境科学学报, 23: 472–475
- 方叠, 钱跃东, 王勤耕, 段宁. 2013. 区域复合型大气污染调控模型研究. 中国环境科学, 33: 1215–1222
- 曾庆存, 吴琳. 2018. 大气污染的最优调控与污染源反演问题 I: 离线模式非完整伴随算子的应用. 中国科学: 地球科学, 48: 1110–1115
- 朱江, 曾庆存. 2002. 控制大气污染的一个数学理论框架. 中国科学D辑: 地球科学, 32: 864–870
- Byun D, Schere K L. 2006. Review of the governing equations, computational algorithms, and other components of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modeling system. Appl Mech Rev, 59: 51–77
- Sanin N, Montero G. 2007. A finite difference model for air pollution simulation. Adv Eng Software, 38: 358–365
- Tangermann G. 1978. Numerical simulations of air pollutant dispersion in a stratified planetary boundary layer. Atmos Environ, 12: 1365–1369
- Wang Q, Liu P, Zhang Z. 2013. A characteristic finite volume element method for the air pollution model. Numer Funct Anal Opt, 34: 664–694

(责任编辑: 王体健)