第28卷第5期 计 算 力 学 学 报 Vol. 28, No. 5
2011年10月 Chinese Journal of Computational Mechanics October 2011

文章编号:1007-4708(2011)05-0693-06

一维大气污染模型的特征-块中心差分法

王玉平， 张志跃*

(南京师范大学 大规模复杂系统数值模拟江苏省重点实验室 数学科学学院,南京 210046)

摘　要:将特征-块中心差分法应用于一维大气污染模型中,求得非均匀网格上污染物浓度及其对空间变量的一阶导数项的差分解和误差估计,此法的计算量与基于线性插值的特征差分法相当,其近似解与基于二次插值的特征差分法的近似解有相同阶的误差估计。最后,通过数值实验说明了该方法的可行性和有效性。

关键词:大气污染模型;特征-块中心差分法;误差估计

中图分类号:O241.82　　**文献标志码**:A

1 引　言

大气污染是指大气中的污染物质的浓度达到了有害程度,以致破坏生态系统和人类正常生存和发展条件而造成危害的现象。大气污染对人体的危害也相当严重,可引起支气管炎、肺结核、肺气肿及肺癌等各种疾病。现在,大气污染已受到越来越多的关注,通过对其进行数值模拟,可以了解其运动规律,进而为大气污染的预测和防治提供理论依据。在大气科学领域,大气污染问题属于非线性大气动力学的范畴,其研究日益活跃起来[1]。非线性研究[2-4]结果揭示了大气现象的复杂性、多样性和不确定性,其理论成果使理解了大气中的各种现象,如大气污染的运动等,进而为预测提供理论依据。然而,实现精确预测的一个关键就是准确的数值模拟和高效的数值求解。

将特征差分法应用于求解对流扩散方程已有若干结果。1982年,文献[5]提出解对流扩散问题的特征差分方法,网格节点为均匀分布,求解区域为直线,讨论了基于二次插值的特征差分格式。1993年,文献[6]讨论了解非线性对流扩散问题的特征差分法,求解区域为矩形,网格节点为均匀分布,该文讨论了两种基于(三角形、矩形)二次插值的差分格式。1999年,文献[7]讨论了具有混合边界条件的非线性对流扩散方程的特征-块中心差分方法,求解区域为矩形,网格节点为非均匀分布。由于对流扩散方程可以用来描述许多物理变化过程,例如溶液中溶质的输运过程,空气污染与水污染,传热等,因此特征差分法在实际中的应用也很广泛。文献[8]从生产实际出发,提出了可压缩两相渗流驱动问题的二维分数步长特征差分格式,此法已经成功地应用于油资源评估和强化采油数值模拟中。

求解大气污染模型的方法很多,如有限体积元法[9,10],有限差分法[11],矩阵分解近似法[12,13]等。本文结合特征方法和块中心差分方法讨论大气污染模型。此法的计算量和基于线性插值的特征-差分法相当,但是近似解和基于二次插值的特征-差分法的近似解具有相同阶误差估计,而解的一阶导数近似则具有超收敛误差估计,达到与近似解同样的精度。数值实验表明此法对于求解大气污染问题具有可行性和有效性,对控制和改善大气污染具有重要意义。

为简单起见,只讨论了两种主要污染物。考虑下面一维大气污染模型[14]的初边值问题:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c_1}{\partial t} + v\dfrac{\partial c_1}{\partial x} - \dfrac{\partial}{\partial x}\left(k_x \dfrac{\partial c_1}{\partial x}\right) = E_1(x,t) + Q_1(c_1,c_2) \\ \dfrac{\partial c_2}{\partial t} + v\dfrac{\partial c_2}{\partial x} - \dfrac{\partial}{\partial x}\left(k_x \dfrac{\partial c_2}{\partial x}\right) = E_2(x,t) + Q_2(c_1,c_2) \\ \qquad \forall (x,t) \in I \times J \\ c_1(x,S) = c_1^0(x),\ c_2(x,S) = c_2^0(x),\ x \in I \\ c_1(a,t) = c_{1a}, \quad c_1(b,t) = c_{1b}, \quad t \in J \\ c_2(a,t) = c_{2a}, \quad c_2(b,t) = c_{2b}, \quad t \in J \end{cases} \tag{1}$$

式中 $I=[a,b]$,∂I 表示 I 的边界,$J=(S,T)$,

收稿日期:2009-09-08;**修改稿收到日期**:2009-12-29.
基金项目:国家自然科学基金(11071123);江苏省自然科学基金(BK2009397)资助项目.
作者简介:王玉平(1981-),女,硕士生;
张志跃*(1966-),男,教授,博士生导师
(E-mail: zhangzhiyue@njnu.edu.cn).

$c_1^0(x)$，$c_2^0(x)$，$E(x,t)$，Q 为已知的光滑函数，c_1 和 c_2 表示两种化学物的浓度，$v(x,t)$ 为风速，k_x 为水平扩散系数，Q 表示化学反应，$E(x,t)$ 表示化学类弥散。

记 $\phi(x,t)=\{1+v^2(x,t)\}^{1/2}$，$u_n=-\partial c_n/\partial x$，$H_n=E_n(x,t)+Q_n(c_1,c_2)(n=1,2)$，用 τ 表示和算式 $\partial c_n/\partial t+v(\partial c_n/\partial x)$ 有关的特征方向：$\partial/\partial\tau=(1/\phi(x,t))(\partial/\partial t+v(\partial/\partial x))$，则问题(1)可写为下列形式：

$$\begin{cases}\phi(x,t)\dfrac{\partial c_1}{\partial\tau}+\dfrac{\partial}{\partial x}(k_xu_1)=H_1(x,t,c_1,c_2)\\ \phi(x,t)\dfrac{\partial c_2}{\partial\tau}+\dfrac{\partial}{\partial x}(k_xu_2)=H_2(x,t,c_1,c_2)\\ \qquad\forall(x,t)\in I\times J\\ c_1(x,S)=c_1^0(x),c_2(x,S)=c_2^0(x),x\in I\\ c_1(a,t)=c_{1a},\quad c_1(b,t)=c_{1b},\quad t\in J\\ c_2(a,t)=c_{2a},\quad c_2(b,t)=c_{2b},\quad t\in J\end{cases}\tag{2}$$

以下用符号 k 和 ε 分别表示一般的正常数和充分小的正常数，其在不同的地方可以表示不同的值。给定下列假设：

(H1) $\|c_n\|_{L^\infty(S,T,L^\infty(D))}\leqslant k_0$，$\hat{k}=k_0+1$，$n=1,2$。

(H2) $\forall(x,t)\in I\times J$，$v$ 连续可微且 $|v|\leqslant k$。

(H3) Q_n 满足 Lipschitz 条件，$n=1,2$。

(H4) $\forall x\in I$，存在正常数 k_1，k_2 使得 $k_1\leqslant k_x\leqslant k_2$。

此外，记 $\|c_n\|_{c^s(I\times J)}=\sup\limits_{(x,t)\in I\times J,|i|\leqslant s}\left|\dfrac{\partial c_n^i}{\partial x^{i_1}\partial t^{i_2}}\right|$。

2 网格函数空间

区域 I 的剖分 δ_x 定义为 $a=x_{1/2}<x_{3/2}<\cdots<x_{N-1/2}<x_{N+1/2}=b$，$\Delta t$ 是时间步长，$t_j=j\Delta t$，$j=0,1,\cdots,r$；$r=[T/\Delta t]$。

定义 当 $i=1,2,\cdots,N$ 时，有

$$x_i=\frac{x_{i-1/2}+x_{i+1/2}}{2},h_i=x_{i+1/2}-x_{i-1/2}$$

$$(D_xf)_i=\frac{f_{i+1/2}-f_{i-1/2}}{h_i},\ \bar{f}_i=\frac{f_{i+1/2}+f_{i-1/2}}{2}$$

当 $i=2,3,\cdots,N$ 时，有

$$h_{i-1/2}=\frac{h_i+h_{i-1}}{2},\ (d_xg)_{i-1/2}=\frac{g_i-g_{i-1}}{h_{i-1/2}}$$

$$h_{1/2}=2(x_1-x_{1/2}),\ h=\max_{1\leqslant i\leqslant N}\{h_i\}$$

$$\bar{h}=\min_{1\leqslant i\leqslant N}\{h_i\},\ h_{N+1/2}=2(x_{N+1/2}-x_N)$$

用记号 S_h 和 $S_h^{(1)}$ 表示两类网格函数族：

$$S_h=\left\{g_{ni},g_{na},g_{nb}\left|\begin{array}{l}g_{na}=g_n(a)=c_{na},g_{nb}=g_n(b)=c_{nb}\\ g_{ni}=g_n(x_i),i=1,2,\cdots,N\end{array}\right.\right\}$$

$$S_h^{(1)}=\{g_{i-1/2}\,|\,g_{i-1/2}=g(x_{i-1/2}),i=1,2,\cdots,N+1\}$$

S_h 和 $S_h^{(1)}$ 上定义的内积及范数与文献[7]中的类似。

约定 在 I 外的区域中，$c_n(n=1,2)$ 值恒为 0。

3 特征-块中心差分格式及其误差估计

对 $x\in I_i$，$i=1,2,\cdots,N$，定义：

$$D_i=(x_{i-1/2},x_{i+1/2}),\bar{g}_i^j=(g_{i-1/2}^j+g_{i+1/2}^j)/2$$

$$(z_n)^{j-1}(x)=(z_n)_i^{j-1}-(x-x_i)(\overline{w}_n)_i^j$$

$$\hat{x}_i=x_i-v(x_i,t_j)\Delta t,\ (\hat{z}_n)_i^{j-1}=(z_n)^{j-1}(\hat{x}_i)\tag{3}$$

不失一般性，假设 $\Delta t=O(h^2)$(即存在正常数 d_1 和 d_2，使 $d_1h^2\leqslant\Delta t\leqslant d_2h^2$ 成立)，那么如果 I 的剖分是正则的(存在常数 $\sigma>0$，使得 $h/\bar{h}\leqslant\sigma$)，则当 $h\leqslant 1/2d_2R\sigma$ 时，有

$$\Delta t\leqslant\frac{\bar{h}}{2R}\tag{4}$$

解问题式(1)的特征中心差分格式有下列形式：求 $(z_n^j,w_n^j)\in S_h\times S_h^{(1)}$，$n=1,2$，使 $i=1,2,\cdots,N$ 时，有

$$\frac{(z_1)_i^j-(\hat{z}_1)_i^{j-1}}{\Delta t}+[D_x(k_xw_1)]_i^j=H_1(x_i,t_j,(z_1)_i^{j-1},(z_2)_i^{j-1})\tag{5}$$

$$\frac{(z_2)_i^j-(\hat{z}_2)_i^{j-1}}{\Delta t}+[D_x(k_xw_2)]_i^j=H_2(x_i,t_j,(z_1)_i^j,(z_2)_i^{j-1})\tag{6}$$

$$(w_n)_{i-1/2}^j=-(d_xz_n^j)_{i-1/2}\tag{7}$$

$$z_1(x_i,S)=(c_1)_i^1,\ z_2(x_i,S)=(c_2)_i^1\tag{8}$$

将 $(w_n)^j=-(d_xz_n^j)$ 代入式(5,6)得到解未知量 $(z_n)_i^j$ 的线性代数方程组，其系数矩阵是不可约对角占优的，因此解存在且唯一。

为导出格式(5～8)的误差估计，将式(2)写成下列形式：

$$\frac{(c_1)_i^j-(\hat{c}_1)_i^{j-1}}{\Delta t}+[D_x(k_xu_1)]_i^j+(A_1)_i^j=H_1(x_i,t_j,(c_1)_i^{j-1}+f_i^j,(c_2)_i^{j-1}+g_i^j)\tag{9}$$

$$\frac{(c_2)_i^j-(\hat{c}_2)_i^{j-1}}{\Delta t}+[D_x(k_xu_2)]_i^j+(A_2)_i^j=H_2(x_i,t_j,(c_1)_i^j,(c_2)_i^{j-1}+g_i^j)\tag{10}$$

式中 $(A_n)_i^j=(R_n)_i^j+(\theta_n)_i^j$

$$(R_n)_i^j=\phi_i^j\frac{\partial(c_n)_i^j}{\partial\tau}-\frac{(c_n)_i^j-(\hat{c}_n)_i^{j-1}}{\Delta t}$$

$$(\theta_n)_i^j=[\frac{\partial}{\partial x}(k_xu_n)]_i^j-[D_x(k_xu_n)]_i^j=$$

$$-\frac{1}{2h_i}\int_{-h_i/2}^{h_i/2}(\frac{h_i}{2}-|y|)^2\frac{\partial^3(k_xu_n)}{\partial y^3}(x_i+y,t_j)\mathrm{d}y$$

$$f_i^j = (c_1)_i^j - (c_1)_i^{j-1} = \int_{t_{j-1}}^{t_j} \frac{\partial[(c_1)_i](t)}{\partial t}\mathrm{d}t$$

$$g_i^j = (c_2)_i^j - (c_2)_i^{j-1} = \int_{t_{j-1}}^{t_j} \frac{\partial[(c_2)_i](t)}{\partial t}\mathrm{d}t$$

令 $P^{j-1}(x) = P_i^{j-1} - (x - x_i)\bar{V}_i^j,\ x \in D_i$

$$\alpha_n = z_n - P_n,\ \beta_n = w_n - V_n$$

$$\eta_n = P_n - c_n,\ \xi_n = V_n - u_n$$

$$F_1 = H_1(x, t_j, z_1^{j-1}, z_2^{j-1}) - H_1(x, t_j, c_1^{j-1} + f^j, c_2^{j-1} + g^j)$$

$$F_2 = H_2(x, t_j, z_1^j, z_2^{j-1}) - H_2(x, t_j, c_1^j, c_2^{j-1} + g^j)$$

利用方程(5～10)，然后两边分别和$((\alpha_n)_i^j - (\alpha_n)_i^{j-1})/\Delta t$作内积，可得

$$\left(\frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t} + D_x[(k_x\beta_1)]^j, \frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t}\right)_M = \left(F_1, \frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t}\right)_M + \left(\frac{\hat{\eta}_1^{j-1} - \eta_1^j}{\Delta t}, \frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t}\right)_M - \left([D_x(k_x\xi_1)]^j, \frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t}\right)_M + \left(\frac{\hat{\alpha}_1^{j-1} - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t}, \frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t}\right)_M + \left(A_1^j, \frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t}\right)_M \tag{11a}$$

$$\left(\frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t} + D_x[(k_x\beta_2)]^j, \frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t}\right)_M = \left(F_2, \frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t}\right)_M + \left(\frac{\hat{\eta}_2^{j-1} - \eta_2^j}{\Delta t}, \frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t}\right)_M - \left([D_x(k_x\xi_2)]^j, \frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t}\right)_M + \left(\frac{\hat{\alpha}_2^{j-1} - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t}, \frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t}\right)_M + \left(A_2^j, \frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t}\right)_M \tag{11b}$$

定理 1　假设 $c_n \in C^4(I \times J)$，则

$$\| z_n^r - c_n^r \|_M + \| w_n^r - u_n^r \|_x \leqslant K(\Delta t + h^2)$$

证明　应用数学归纳法，对于充分小的 h，证明当 $j = 0, 1, 2, \cdots r$。

$$\| z_n^j \|_c \leqslant \hat{K} \tag{12}$$

当 $j = 0$，方程(12)显然成立。现在假设对所有的 $j \leqslant r-1$，不等式(12)成立，下面证明 $j = r$时，式(12)也成立，为此首先对式(11)的各项进行估计。

$$\left(\frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t}, \frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t}\right)_M = \left\| \frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t} \right\|_M^2 \tag{13}$$

由文献[7]可得

$$\left([D_x(k_x\beta_n)]^j, \frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t}\right)_M \geqslant \frac{1}{2\Delta t}[(k_x\beta_n^j, \beta_n^j)_x - (k_x\beta_n^{j-1}, \beta_n^{j-1})_x] \tag{14}$$

由 ε 不等式，归纳假设，假设(H3)有

$$\left|\left(F_1, \frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t}\right)_M\right| \leqslant K[\| \beta_1^{j-1} \|_x^2 + \| \eta_1^{j-1} \|_M^2 + \| f^j \|_M^2 + \| \beta_2^{j-1} \|_x^2 + \| \eta_2^{j-1} \|_M^2 + \| g^j \|_M^2] + \varepsilon \left\| \frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t} \right\|_M^2 \tag{15a}$$

$$\left|\left(F_2, \frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t}\right)_M\right| \leqslant K[\| \beta_1^j \|_x^2 + \| \eta_1^j \|_M^2 + \| \beta_2^{j-1} \|_x^2 + \| \eta_2^{j-1} \|_M^2 + \| g^j \|_M^2] + \varepsilon \left\| \frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t} \right\|_M^2 \tag{15b}$$

由 Taylor 公式得

$$(\hat{\eta}_n)_i^{j-1} = (\eta_n)_i^j + (\hat{x}_i - x_i)\frac{\partial \eta_n}{\partial x}(x_i, t_j) - \Delta t \frac{\partial \eta_n}{\partial t}(x_i, t_j) + \| c_n \|_{c^2(I \times J)} \times O[(\Delta t)^2]$$

$$\frac{\partial \eta_n}{\partial x}(x_i, t_j) = -(\bar{V}_n)_i^j + (\bar{u}_n)_i^j + \frac{1}{8}h_i^2 \frac{\partial^3 c_n}{\partial x^3}(\tilde{x}_i, t_j)$$

其中 $\tilde{x}_i = \lambda x_{i-1/2} + (1-\lambda)x_{i+1/2}, 0 < \lambda < 1$

$$\frac{\partial \eta_n}{\partial t}(x_i, t_j) = O(h^2)$$

$$\left|\left(\frac{\hat{\eta}_n^{j-1} - \eta_n^j}{\Delta t}, \frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t}\right)_M\right| \leqslant K[(\Delta t)^2 + h^4] + \varepsilon \left\| \frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t} \right\|_M^2 \tag{16}$$

由 ε 不等式：

$$\left|\left(\frac{\hat{\alpha}_n^{j-1} - \alpha_n^j}{\Delta t}, \frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t}\right)_M\right| \leqslant K \| \beta_n^{j-1} \|_x^2 + \varepsilon \left\| \frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t} \right\|_M^2 \tag{17}$$

$$\left|\left(A_n^j, \frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t}\right)_M\right| \leqslant K(\| R_n^j \|_M^2 + \| \theta_n^j \|_M^2) + \varepsilon \left\| \frac{\alpha_n^j - \alpha_n^{j-1}}{\Delta t} \right\|_M^2 \tag{18}$$

把方程(13～18)分别代入式(11)并注意到 ε是充分小的正数，得

$$\frac{1}{2\Delta t}\{(k_x\beta_1^j, \beta_1^j)_x - (k_x\beta_1^{j-1}, \beta_1^{j-1})_x\} \leqslant K[(\Delta t)^2 + h^4 + \| \beta_1^{j-1} \|_x^2 + \| \eta_1^{j-1} \|_M^2 + \| f^j \|_M^2 + \| \beta_2^{j-1} \|_x^2 + \| \eta_2^{j-1} \|_M^2 + \| g^j \|_M^2 + \| R_1^j \|_M^2 + \| \theta_1^j \|_M^2] - \left([D_x(k_x\xi_1)]^j, \frac{\alpha_1^j - \alpha_1^{j-1}}{\Delta t}\right)_M \tag{19a}$$

$$\frac{1}{2\Delta t}\{(k_x\beta_2^j, \beta_2^j)_x - (k_x\beta_2^{j-1}, \beta_2^{j-1})_x\} \leqslant K[(\Delta t)^2 + h^4 + \| \beta_1^j \|_x^2 + \| \eta_1^j \|_M^2 + \| \beta_2^{j-1} \|_x^2 + \| \eta_2^{j-1} \|_M^2 + \| g^j \|_M^2 + \| R_2^j \|_M^2 + \| \theta_2^j \|_M^2] - \left([D_x(k_x\xi_2)]^j, \frac{\alpha_2^j - \alpha_2^{j-1}}{\Delta t}\right)_M \tag{19b}$$

利用分步求和公式得

$$\left|\Delta t\sum_{n=1}^{r}([D_x(k_x\xi_n)]^j,\frac{\alpha_n^j-\alpha_n^{j-1}}{\Delta t})_M\right|\leqslant K[\|\xi_n^r\|_x^2+\|\xi_n^1\|_x^2+\|\xi_n^0\|_x^2]+k\Delta t\sum_{n=1}^{r-1}(\|\frac{\partial\xi_n(t_j^1)}{\partial t}\|_x^2+\|\beta_n^j\|_x^2)+\varepsilon\|\beta_n^r\|_x^2 \tag{20}$$

其中 $t_{j-1}<t_j^1<t_j$，方程(19)×$\Delta t/k_x$，并对所有的 $1\leqslant j\leqslant r$ 求和，再利用式(20)，得

$$\|\beta_1^r\|_x^2+\|\beta_2^r\|_x^2\leqslant K\{(\Delta t)^2+h^4+(\Delta t)O(h^2)+\Delta t\sum_{j=1}^{r-1}(\|\beta_1^j\|_x^2+\|\beta_2^j\|_x^2)+(\Delta t)^2\|\phi^4\|_c\|\frac{\partial^2 c_1}{\partial\tau^2}\|_{L^2(j,l^2)}^2+h^4\Delta t\sum_{j=1}^{r}\|\frac{\partial^3(u_2^x)}{\partial x^3}\|_{l_x^2}^2+(\Delta t)^2\|\frac{\partial c_1}{\partial t}\|_{L^2(j,M)}^2+(\Delta t)^2\|\phi^4\|_c\|\frac{\partial^2 c_2}{\partial\tau^2}\|_{L^2(j,l^2)}^2+h^4\Delta t\sum_{j=1}^{r}\|\frac{\partial^3(u_1^x)}{\partial x^3}\|_{l_x^2}^2\} \tag{21}$$

对式(21)应用离散的Gronwall不等式和假设条件 $\Delta t=O(h^2)$，有

$$\|\beta_1^r\|_x^2+\|\beta_2^r\|_x^2\leqslant K\{(\Delta t)^2+h^4\} \tag{22}$$

故 $\|\beta_n^r\|_x^2\leqslant K\{(\Delta t)^2+h^4\}$。

根据文献[7]，存在 $h_1>0$，使得对所有的 $h\leqslant h_1$ 有$\|\alpha_n^r\|_c\leqslant k\|\beta_n^r\|_x\leqslant 1/2$。进一步得$\|z_n^r\|_c\leqslant\|\alpha_n^r\|_c+\|\eta_n^r\|_c+\|c_n^r\|_c\leqslant\hat{k}$，即当 $j=r$ 时，结论(12)成立。最后得$\|z_n^r-c_n^r\|_M+\|w_n^r-u_n^r\|_x\leqslant K(\Delta t+h^2)$。

4 数值例子

考虑初边值问题：

$$\frac{\partial c_1}{\partial t}+2\frac{\partial c_1}{\partial x}-4\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}=c_1+\frac{1}{5}c_2-\frac{1}{\sqrt{16\pi t}}(\frac{x}{4t}+2)e^{(-x^2/16t)}$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t}+2\frac{\partial c_2}{\partial x}-4\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}=2c_1+c_2-\frac{5}{\sqrt{16\pi t}}(\frac{x}{4t}+\frac{7}{5})e^{(-x^2/16t)}$$

$$c_1(x,1)=\frac{1}{\sqrt{16\pi}}e^{(-x^2/16)},\quad c_2(x,1)=5c_1(x,1)$$

$$c_1(0,t)=\frac{1}{\sqrt{16\pi t}},\qquad c_2(0,t)=5c_1(0,t)$$

$$c_1(20,t)=\frac{1}{\sqrt{16\pi t}}e^{(-400/16t)},c_2(20,t)=5c_1(20,t)$$

表 1 $T=2$ 时 $|c_n-d_n|$ 和 $|c_n-z_n|$ $(n=1,2)$ 的比较

Tab.1 Comparison of the error estimates at $T=2$

节点	$\lvert c_1-d_1\rvert$	$\lvert c_1-z_1\rvert$	$\lvert c_2-d_2\rvert$	$\lvert c_2-z_2\rvert$
2.9500	0.0027	0.0019	0.0095	0.0063
7.9500	0.0014	5.9818e−004	0.0050	0.0018
12.9500	2.8770e−004	1.7084e−004	9.9259e−004	5.4029e−004
17.9500	5.8093e−006	3.9092e−006	1.9078e−005	1.1831e−005

式中 $(x,t)\in I\times J, I=[0,20], J=[1,2]$，且该方程的精确解为

$$c_1(x,t)=\frac{1}{\sqrt{16\pi t}}e^{(-x^2/16t)},c_2(x,t)=5c_1(x,t)$$

定义 c_n 的绝对误差为 $|(c_n)_i^j-(z_n)_i^j|$，L^2 范数为 $\|(c_n)^j-(z_n)^j\|_{L^2}^2=\sum_{i=1}^{N}[(c_n)_i^j-(z_n)_i^j]^2h$。表 1 为 $T=2$，时间步长 $\Delta t=0.01$，空间步长 $h=0.1$ 时，不同节点处 $|c_n-d_n|$ 和 $|c_n-z_n|$ $(n=1,2)$ 的比较，其中 c_n 表示精确解，z_n 表示按本文的离散方式得到的特征块中心差分解，d_n 表示迎风隐式差分解。

表 2 为 $T=2$ 时，取不同时空步长，特征块中心差分解与精确解误差的 L^2 范数及 CPU 运行时间。从表 2 可以看出，当时空步长选取适当时，用特征块中心差分法解此类问题所得的数值解比较接近精确解，误差阶与理论分析一致，说明这一方

表 2 $T=2$ 时绝对误差的 L^2 范数及 CPU 运行时间

Tab.2 The error estimates and CPU time at $T=2$

时空步长	c_1 的 L^2 范数	c_2 的 L^2 范数	CPU 时间
$\Delta t=0.02, h=0.2$	0.0091	0.0304	8.2500
$\Delta t=0.01, h=0.2$	0.0046	0.0152	9.9680
$\Delta t=0.008, h=0.08$	0.0038	0.0125	21.6880

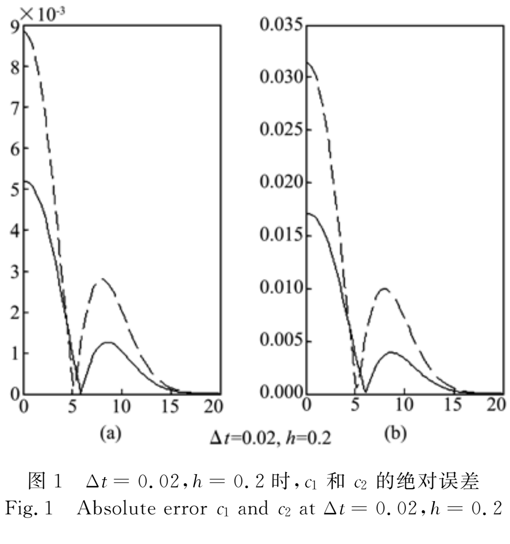

图 1 $\Delta t=0.02, h=0.2$ 时，c_1 和 c_2 的绝对误差

Fig.1 Absolute error c_1 and c_2 at $\Delta t=0.02, h=0.2$

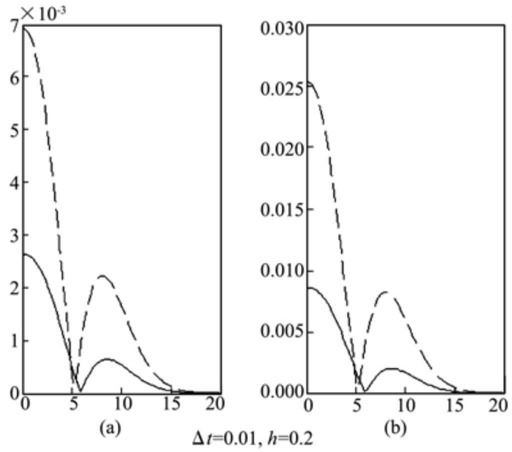

图 2　$\Delta t=0.01, h=0.2$ 时，c_1 和 c_2 的绝对误差
Fig. 2　Absolute error c_1 and c_2 at $\Delta t=0.01, h=0.2$

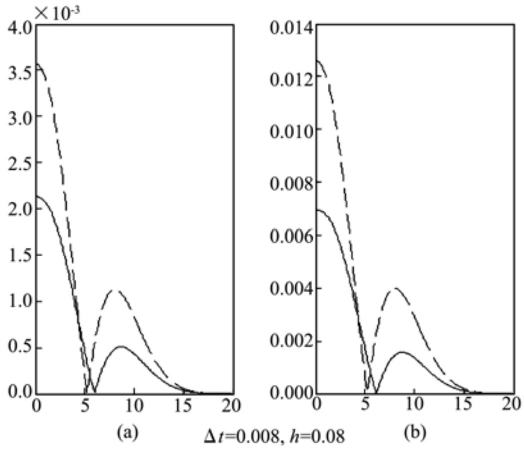

图 3　$\Delta t=0.008, h=0.08$ 时，c_1 和 c_2 的绝对误差
Fig. 3　Absolute error c_1 and c_2 at $\Delta t=0.008, h=0.08$

法解这类问题是有效的。此外表 2 还说明，随着时空步长的加密，绝对误差的范数变小，并且 CPU 的运行时间短。

图 1～图 3 是 $T=2$ 时不同时空步长下数值解的绝对误差图，其中图 1(a)～图 3(a) 是第一种污染物浓度的误差曲线，图 1(b)～图 3(b) 是第二种污染物浓度的误差曲线，实线表示特征中心差分解的绝对误差，虚线表示隐式差分解的绝对误差。根据上图，可以更为直观地看出在不同时空步长时，特征中心差分解与精确解的逼近程度更好，达到了理论分析的精度，且随着时空步长的加密，解的绝对误差也在减小，显示了特征块中心差分法对解这类问题是可行和有效性的。

参考文献(References)：

[1] 李建平，丑纪范. 非线性大气动力学进展[J]. 大气科学，2003，**27**(4)：653-673.(LI Jian-ping, CHOU Ji-fan. Advances in nonlinear atmospheric dynamics [J]. *Chinese Journal of Atmospheric Sciences*, 2003, **27**(4)：653-673.(in Chinese))

[2] ZHANG Z Y, LIN J. Dynamics of jovian atmospheres with applications of nonlinear singular vector method[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2007, **55**(8)：713-721.

[3] MU M, ZHANG Z Y. Conditional nonlinear optimal perturbations of a two-dimensional quasi-geostrophic model[J]. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 2006, **163**：1587-1604.

[4] 王　平，张志跃. 有限体积元数值方法在大气污染模式中的应用[J]. 计算物理，2009，**26**(5)：656-664.(WANG Ping, ZHANG Zhi-yue. Finite volume element method in air pollution model[J]. *Chinese Journal of Computational Physical*, 2009, **26**(5)：656-664.(in Chinese))

[5] J Douglas, T F Russell. Numerical methods for convection-dominated diffusion problem based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures[J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1982, **19**：871-885.

[6] 由同顺. 二维非线性对流扩散方程的特征差分解法[J]. 计算数学，1993，**15**(4)：402-409.(YOU Tong-shun. The characteristic difference method for nonlinear convection diffusion problems in two space variable[J]. *Mathematica Numerical Sinica*, 1993, **15**(4)：402-409.(in Chinese))

[7] 王申林，孙淑英. 对流-扩散问题的特征块中心差分法[J]. 计算数学，1999，**21**(4)：463-474.(WANG Shen-lin, SUN Shu-ying. Numerical methods for convection diffusion problems based on combining the method of Character-ristic with block-centered finite difference procedure [J]. *Mathematica Numerical Sinica*, 1999, **21**(4)：463-474.(in Chinese))

[8] 袁益让. 可压缩两相驱动问题的分数步长特征差分格式[J]. 中国科学，1998，**28**(10)：893-902.(YUAN Yi-rang. The Characteristic finite difference fractional steps method for compressible two-phase displacement problem[J]. *Science in China*, 1998, **28**(10)：

893-902.(in Chinese))

[9] 朱 玲,张志跃.一类非线性发展方程全离散有限体积元方法及其分析[J].计算力学学报,2008,**25**(3):304-309.(ZHU Ling,ZHANG Zhi-yue. Fully discrete finite volume method and numerical analysis for a class of non-linear evolution equation[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*,2008,**25**(3):304-309.(in Chinese))

[10] WANG P, ZHANG Z Y. Quadratic finite volume element method for the air pollution model[J]. *International Journal of Computer Mathematics*, 2010, **13**:2925-2944.

[11] 桑建国,温市耕.大气扩散的数值计算[M].北京:气象出版社,1992.(SANG Jian-guo,WEN Shi-geng. *Numerical Calculation of Atmospheric Diffuseion*[M]. Beijing:Meteorological Press,1992.(in Chinese))

[12] J G Blom,J G Verwer. A Comparison of integration methods for atmospheric transport chemistry problems[J]. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2000,**126**:381-396.

[13] M A Botchev, J G Verwer. A new approximate matrix factorization for implicit time integration in air pollution modelling[J]. *Journal of Computational and Applied Mathematics*,2003,**157**:309-327.

[14] Lise M Frohn, Jesper H. Christensen and Jorgen Brandt. Development of a High-Resolution nested air pollution model [J]. *Journal of Computational Phsics*,2002,**79**:68-94.

Numerical methods based on characteristic block-centered finite difference method for one dimensional air pollution model

WANG Yu-ping, ZHANG Zhi-yue*

(Jiangsu Provincial Key Laboratory for Numerical Sinulation of Large Scale Complex Systems, School of Mathematical Sciences, Nanjing Normal University,Nanjing 210046, China)

Abstract: In this paper, we propose the characteristic block-centered finite difference method on nonuniform grids to solve the problem of one dimensional air pollution model . Approximate solutions and error estimates of air pollution concentrations and their first derivatives for space variable are obtained . The computational labour of the method is the same as it of the characteristic difference method based on linear interpolation. The error order of the approximate solutions is the same as it of the characteristic difference method based on quadratic interpolation. At last, a numerical example is given to illustrate feasibility efficiency of this method.

Key words: air pollution model; characteristic block-centered difference method;the error estimate