«Оптика атмосферы и океана», **20,** № 1 (2007)

УДК 517.947:551.551

А.И. Бородулин, Б.М. Десятков, Н.А. Лаптева, А.Н. Шабанов

Определение границ облака распространяющихся атмосферных примесей

НИИ аэробиологии ГНЦ ВБ «Вектор», пос. Кольцово Новосибирской обл.

Поступила в редакцию 27.11.2005 г.

Для моделирования процесса распространения атмосферных примесей широко используется полуэмпирическое уравнение турбулентной диффузии. Однако определение концентрации атмосферных примесей на больших расстояниях от источников с помощью полуэмпирического уравнения является некорректным. Ранее было показано, что при выполнении некоторого ограничения на время распространения примеси для описания диффузии с конечной скоростью можно использовать полуэмпирическое уравнение на подвижных границах, определяемых максимальными значениями пульсаций скорости среды. Рассматривается трехмерная задача определения границ области, в пределах которой происходит распространение атмосферных примесей.

Полуэмпирическое уравнение турбулентной диффузии [1] широко используется для моделирования процесса распространения атмосферных примесей. Имея производную по времени первого порядка, оно относится к уравнениям параболического типа. Вследствие этого его решения обладают свойством «бесконечной» скорости распространения. Иными словами, после срабатывания какого-либо источника за сколь угодно малое время на сколь угодно большом расстоянии от него в решениях уравнения наблюдаются малые, но конечные значения математического ожидания концентрации примеси. Это обстоятельство явно противоречит фактической ограниченности скорости движения частиц примеси. Поэтому, например, определение концентрации атмосферных примесей на больших расстояниях от источников с помощью полуэмпирического уравнения является некорректным.

Известны попытки преодолеть данное ограничение с помощью замены параболического уравнения уравнением гиперболического типа. Такая модель диффузии для одномерного случая, например, описана в [1]. Однако обобщение этих результатов на случай диффузии примеси в трехмерном пространстве не представляется возможным. Этот факт достаточно подробно проанализирован в [2] на основании фундаментальных свойств уравнений гиперболического типа.

В [3] с использованием естественного предположения о конечных значениях экстремальных значений пульсаций скорости ветра, а также аппарата теории марковских процессов была сформулирована и решена одномерная краевая задача, имеющая свойство конечной скорости распространения примесей. Было показано, что при временах распространения T много больше временного масштаба $\tau_0 \approx 18K/U^2$, где K и U – типичные значения коэффициента турбулентной диффузии и скорости ветра, для описания процесса турбулентной диффузии атмосферных примесей с конечной скоростью распространения можно использовать стандартное полуэмпирическое уравнение турбулентной диффузии. При этом граничные условия необходимо ставить на подвижных границах, определяемых экстремальными значениями пульсаций скорости ветра.

Указанное выше временное ограничение при типичных для приземного слоя атмосферы значениях $K \approx 5$ м^2/с и $U \approx 7$ м/с дает оценку $\tau_0 \approx 2$ с. Эта оценка соответствует условию применимости полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии, согласно которому время распространения атмосферных примесей должно быть много больше лагранжева временного масштаба пульсаций скорости ветра τ, поскольку в приземном слое атмосферы лагранжев масштаб по порядку величины составляет десятки секунд. В противоположном случае для описания процесса распространения атмосферных примесей при малых временах распространения можно использовать подход, описанный в [4].

Согласно [3] в одномерном случае для однородной задачи и источника, расположенного в точке x_0 и выбрасывающего всю примесь в момент времени t_0, граничные условия следует задавать на подвижных границах, определяемых выражением

$$\chi_1(x,t) = \int_{t_0}^{t} (\overline{U} + \min \hat{U})\, dt;$$

$$\chi_2(x,t) = \int_{t_0}^{t} (\overline{U} + \max \hat{U})\, dt,$$

где χ_1, χ_2 – левая и правая границы области диффузии соответственно; $\overline{U}$ – среднее значение скорости ветра; $\hat{U}$ – мгновенное значение пульсаций скорости ветра.

В данной статье рассматривается трехмерная задача определения границ области, в пределах которой происходит распространение атмосферных примесей. Решение этой задачи позволяет найти решения полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии с конечной скоростью распространения на основании подхода, описанного в [3].

При выводе полуэмпирического уравнения используется процедура усреднения закона сохранения количества вещества в движущейся среде с периодом много больше лагранжева масштаба пульсаций скорости среды [1]. В силу этого полуэмпирическое уравнение описывает движение ансамбля «жидких» частиц с независимыми приращениями координат за непересекающиеся промежутки времени [5]. Воспользуемся этим свойством и определим границы распространяющегося облака примеси методом статистического моделирования.

Приращения координат жидкой частицы за малое время dt определяются выражениями:

$$dx_i = (\overline{U}_i + \hat{U}_i)\,dt;\ x_i = x, y, z,$$

где $\overline{U}_i$ и $\hat{U}_i$ — компоненты усредненной по статистическому ансамблю скорости среды и мгновенные значения пульсаций скорости соответственно. Приращение координат жидкой частицы за конечный шаг по времени Δt будут следующим:

$$\Delta x_i = \overline{U}_i \Delta t + \int\limits_t^{t+\Delta t} \hat{U}_i\,dt.$$

При шагах по времени Δt много больше лагранжева временного масштаба τ дисперсия приращения координат определяется выражением [6]:

$$\sigma_i^2 = 2K_i \Delta t,$$

где K_i — компоненты тензора коэффициентов турбулентной диффузии, используемые при решении полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии. Значения K_i определяются соответствующими им дисперсиями пульсаций компонент скорости ветра [6]. Известно, что функция распределения пульсаций компонент скорости ветра может быть аппроксимирована нормальным законом [7]. Поэтому окончательно выражение для приращения координат жидкой частицы за время Δt будет иметь вид

$$\Delta x_i = \overline{U}_i \Delta t + \alpha_i \sigma_i,$$

где α_i — случайные нормально распределенные числа с нулевым средним и единичной дисперсией. Ограничим размах пульсаций компонент скорости ветра тремя стандартными отклонениями. Для моделирования α_i будем использовать усеченный нормальный закон

$$F(\alpha_i) = \begin{cases} 0;\ \alpha_i \le -3 \\ \dfrac{1}{2\operatorname{erf}(3/\sqrt{2})}\left[\operatorname{erf}\left(\alpha_i/\sqrt{2}\right) + \operatorname{erf}\left(3/\sqrt{2}\right)\right]; \\ 1;\ \alpha_i \ge 3, \\ -3 < \alpha_i < 3, \end{cases}$$

где $F(\alpha_i)$ — функция распределения α_i; erf — интеграл вероятности.

Полученные соотношения для приращений координат жидких частиц за конечное за время Δt обеспечивают статистическое моделирование границ облака примеси. При этом экстремальные значения пульсаций компонент скорости ветра согласуются с входными параметрами полуэмпирического уравнения — коэффициентами турбулентной диффузии.

Для получения траектории жидкой частицы необходимо и достаточно иметь статистически независимые последовательности трех равномерно распределенных на интервале от нуля до единицы случайных чисел r_i. Значения α_i находятся решением уравнений $r_i = F(\alpha_i)$. Вычисленные указанным выше способом координаты точек всего ансамбля жидких частиц в момент времени t определяют границы облака примеси, соответствующие решению полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии с конечной скоростью распространения.

В случае диффузии примеси от точечного мгновенного источника при отсутствии переноса примеси усредненным полем ветра $\overline{U}_i = 0$ и $K_i = \text{const}$ поверхности равных концентраций в решении полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии будут представлять собой семейство эллипсоидов

$$\frac{x^2}{A_x} + \frac{y^2}{A_y} + \frac{z^2}{A_z} = 1$$

с полуосями A_i. В силу свойств симметрии задачи и приведенных выше рассуждений в данном случае границы облака распространяющейся примеси будут также представлять собой эллипсоид с полуосями $A_i = 3\sqrt{2K_i \Delta t}$.

Рассмотрим задачу диффузии примеси в условиях неоднородного рельефа местности. Пусть источник, расположенный в левобережной части г. Новосибирска, в точке с координатами $x = 5$ км, $y = 11$ км, $z = 100$ м (рис. 1), в момент времени $t_0 = 0$ с выбрасывает в атмосферу $N = 10^{10}$ частиц неоседающей примеси.

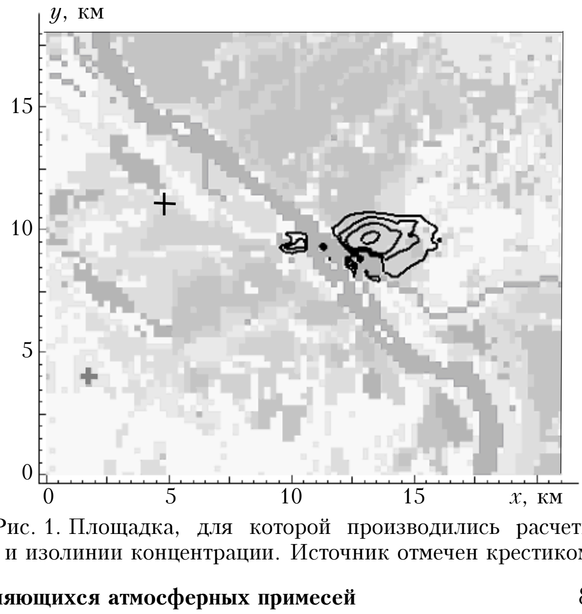

Рис. 1. Площадка, для которой производились расчеты, и изолинии концентрации. Источник отмечен крестиком

Различными оттенками серого цвета выделены различные типы рельефа местности — городская застройка различной этажности, лесные массивы, степь, р. Обь и др. Ось x расположена горизонтально в направлении на восток, ось y — перпендикулярно в горизонтальной плоскости в направлении на север, а ось z — вертикально вверх. Расчетная область покрыта равномерной прямоугольной сеткой с числом ячеек 84×72 с шагом 250 м по горизонтали и 30 с шагом 50 м по вертикали.

Метеорологические условия были заданы типичными для летнего июльского дня на 15 ч местного времени при западном ветре со скоростью 5 м/с на высоте флюгера, расположенного на метеорологическом посту в п. Огурцово на левом берегу р. Оби. Поля средних значений компонент скорости ветра и температуры определялись с помощью численно-аналитической модели [8]. Компоненты тензора коэффициентов турбулентной диффузии находились с помощью алгебраической модели, аналогичной [9]. В этой модели они выражаются через универсальные функции, зависящие от безразмерного критерия устойчивости — градиентного числа Ричардсона, определяемого полями среднего значения скорости ветра и температуры.

Остановимся на алгоритме моделирования траекторий частиц. Для каждой траектории из ансамбля частиц, выпущенного источником, на $n+1$ шаге по времени Δt определялись приращения координат частиц. При этом на каждом шаге значения $\overline{U}_i^n$ и K_i^n определялись линейной интерполяцией по восьми узлам расчетного шаблона, окружающим текущую координату частицы. Последовательности независимых псевдослучайных чисел, равномерно распределенных в интервале от нуля до единицы, вырабатывались с использованием метода вычетов [10]:

$$r_{k+1} = \{Mr_k\},\ r_0 = 2^{-m},$$

где M — достаточно большое целое число; m — количество двоичных разрядов в мантиссе ячейки компьютера. Период таких последовательностей равен 2^{m-2}. Для стандартных 32-разрядных процессоров он составляет примерно 10^9. Для генерирования случайных чисел использовалась подпрограмма DRAND [11] из библиотеки функций пакета Compaq Visual FORTRAN, version 6,5. Средние значения и дисперсии случайных последовательностей удовлетворяли стандартным условиям равномерного распределения случайных чисел в интервале от нуля до единицы: $\overline{r_i} = 0{,}5$ и $\sigma_{ri}^2 = 1/12$ с точностью не хуже чем 10^{-5}. Коэффициенты корреляции пар использованных случайных последовательностей отличались от нулевых значений менее чем на 10^{-6}.

Если на $n+1$ шаге по времени z-координата находилась ниже уровня подстилающей поверхности, то производился переход к моделированию следующей траектории ансамбля, а частица считалась поглощенной подстилающей поверхностью. Аналогично поступали и тогда, когда на $n+1$ шаге по времени полученные координаты выходили за боковые и верхнюю границы заданной прямоугольной области. После определения на момент времени t набора координат всего рассматриваемого ансамбля частиц производилось определение ячеек расчетной прямоугольной области, в которые попала хотя бы одна частица. Такие ячейки отмечались единицей. Ячейки, в которые не попала ни одна частица, помечались нулями. Таким образом, внутри расчетной прямоугольной области выделялась область, на момент времени t определяющая границы распространяющегося облака примеси.

Программа для расчетов границ облака была протестирована на примере диффузии примеси в однородном поле скорости ветра и на постоянных значениях коэффициентов турбулентной диффузии $\overline{U}_i = \text{const}$ и $K_i = \text{const}$. В результате расчетов была получена граница облака в форме эллипсоида, полуоси которого совпадали с теоретическими значениями $A_i = 3\sqrt{2K_i\,\Delta t}$ с точностью до одного шага расчетного шаблона.

На рис. 2 приведен пример полученных границ облака для $t = 800$ с в горизонтальном сечении $z = 50$ м для диффузии примеси над г. Новосибирском. Рассмотренное количество частиц ансамбля составляло $8 \cdot 10^4$ шт.

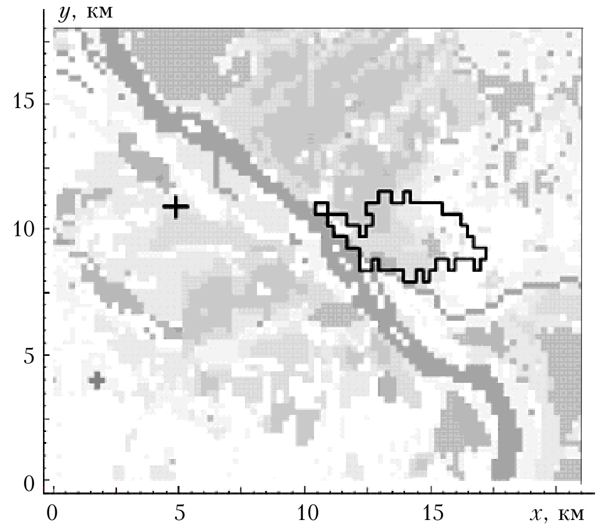

Рис. 2. Границы облака в сечении $z = 50$ м на момент времени $t = 800$ с (выделены). Крестик — источник

Расчеты показали, что для данного примера увеличение числа частиц ансамбля в два раза и более не приводит к существенному изменению границ облака атмосферной примеси. Изолинии концентрации для данного примера получены численным решением полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии (см. рис. 1). Значения концентраций у приведенных изолиний соответствуют 2,5; 2,0; 1,5 и 1,0 шт./м^3 и убывают в сторону границ расчетной области. Приведенное семейство изолиний концентраций примеси по своим характерным размерам совпадет с найденными методом статистического моделирования границами.

Таким образом, общий вид границы облака при диффузии примеси в неоднородной среде и изолинии концентрации в целом не являются подобными, в отличие от случая диффузии примеси в однородном поле скорости ветра и при постоянных значениях коэффициентов турбулентной диффузии. Вероятно, причинами этого являются термическая неоднородность подстилающей поверхности и сложный неоднородный рельеф местности. Отметим, что вне найденных границ облака в решениях полуэмпирического уравнения содержится весьма значительное количество примеси, которое не может быть достоверным из-за конечности скорости распространения частиц. В частности, согласно решению полуэмпирического уравнения, вне границ облака, определенных методом статистического моделирования, в момент времени $t = 800$ с находится более 50% частиц примеси. Заметим также, что в случае диффузии примеси в однородном поле скорости ветра и при постоянных значениях коэффициентов турбулентной диффузии вне границ облака находится не более 3% частиц примеси.

Рассмотренный подход является актуальным при моделировании распространения атмосферных примесей на большие расстояния от источников, при описании динамики изменения полей концентрации атмосферных примесей, в том числе в условиях сложного, неоднородного рельефа местности.

1. *Монин А.С., Яглом А.М.* Статистическая гидромеханика. Механика турбулентности. М.: Наука, 1965. Ч. 1. 720 с.
2. *Галкин Л.М.* Решение диффузионных задач методом Монте-Карло. М.: Наука, 1975. 96 с.
3. *Бородулин А.И.* Об описании турбулентной диффузии с конечной скоростью распространения // Метеорол. и гидрол. 1993. № 4. С. 28–35.
4. *Бородулин А.И.* Моделирование турбулентной диффузии примеси при малых временах распространения // Изв. РАН. Физ. атмосф. и океана. 1993. Т. 29. № 2. С. 208–212.
5. *Феллер Э.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1952. 347 с.
6. *Бызова Н.Л.* Рассеяние примеси в пограничном слое атмосферы. М.: Гидрометеоиздат, 1974. 188 с.
7. *Hennemith B.* Statistical Description of Anisotropic and Inhomogeneous Turbulence // Boundary-Layer Meteorol. 1978. V. 67. P. 489–506.
8. *Десятков Б.М., Сарманаев С.Р., Бородулин А.И.* Численно-аналитическая модель переноса аэрозолей в термически стратифицированном пограничном слое атмосферы // Оптика атмосф. и океана. 1996. Т. 9. № 6. С. 815–820.
9. *Теверовский Е.Н., Дмитриев Е.С.* Перенос аэрозольных частиц турбулентными потоками. М.: Энергоатомиздат, 1988. 160 с.
10. *Ермаков С.М., Михайлов Г.А.* Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982. 296 с.
11. *Prime Modulus M Multiplicative Linear Congruential Generator,* a Modified Version of the Random Number Generator by Park and Miller in «Random Number Generators: Good Ones Are Hard to Find». CACM. 1988. V. 31. N 10. P. 138–141.

A.I. Borodulin, B.M. Desyatkov, N.A. Lapteva, A.N. Shabanov. **Determination of boundaries of a cloud of spreading atmospheric pollutants.**

The semi-empiric equation of the turbulent diffusion is widely used for modeling the spread process of atmospheric pollutants. However, the determination of the concentration of atmospheric pollutants at long distances from the sources with the semi-empiric equation is incorrect. Previously it was shown that when some limitation is fulfilled for the period of the pollutant spread, the semi-empiric equation can be used at mobile boundaries determined by the maximal values of rate pulsations of the medium to describe the diffusion with a finite rate. The work considers the three-dimensional problem of determining the boundaries of the region, within which the spread of atmospheric pollutants occurs.