

М.С. Юдин, К. Вильдероттер

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ АТМОСФЕРНЫХ АЭРОЗОЛЕЙ В МАЛЫХ МАСШТАБАХ

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск
Боннский университет, ФРГ*

Поступила в редакцию 3.03.99 г.

Принята к печати 30.03.99 г.

Обсуждаются развитие и приложения двух моделей численного моделирования распространения аэрозолей в условиях города. Особенностью модели в микромасштабе является ее способность учитывать сложные формы зданий и городских каньонов с помощью построения соответствующих конечных элементов. Мезомасштабная модель основана на конечных разностях и учитывает структуру поверхности с помощью понятия длины шероховатости. Приводятся результаты расчетов по моделям для различных типов поверхностных неоднородностей. Получено удовлетворительное согласие с теоретическими представлениями и данными измерений.

1. Введение

Детальные исследования распространения аэрозолей и климатических характеристик привлекают все больший интерес исследователей [1]. Информация о метеорологических полях, таких как температура, давление, влажность, и т.д., является основой для моделирования переноса и диффузии аэрозолей. Часто такую информацию получают, используя упрощенные инженерные формулы для типичных метеорологических ситуаций. Однако в сложных областях необходимы детальные математические модели, основанные на подробном описании соответствующих физических процессов [2].

Для уменьшения объема вычислений метеорологический фон естественно рассчитывать в два этапа [3]. На первом этапе рассчитывается микроклимат региона, в котором находится интересующий нас объект. На втором этапе полученные данные используются как входные параметры для детального моделирования метеорологических и аэрозольных полей в микромасштабе. Соответственно, в данной работе рассмотрены два типа моделей: мезомасштабная и микромасштабная. Мезомасштабная модель основана на методе конечных разностей и использует координатную систему, «следящую за поверхностью». Тогда расчетная область становится достаточно простой. Однако преобразованные уравнения становятся существенно более сложными для дискретизации. Вообще говоря, такой подход пригоден только в случае достаточно ровной поверхности [4]. Микромасштабная модель основана на методе конечных элементов и применяется для моделирования процессов внутри городских застроек, где гладкая замена переменных уже не может быть использована.

Проблема моделирования переноса аэрозолей в атмосфере имеет ряд характерных особенностей, одной из которых является необходимость построения экономичных алгоритмов для адекватного описания областей, где рассчитываемые поля резко меняются, без существенного измельчения сетки и для подавления ложных осцилляций вблизи фронта распространяющегося аэрозольного облака. В работе [5] рассмотрен вариационный подход к моделированию переноса и диффузии аэрозолей. Здесь использу-

ется более простая схема конечных элементов, основанная на так называемом подходе Петрова–Галеркина, состоящем в добавлении искусственной вязкости только в направлении потока [7]. Эта схема обладает высокой точностью и надежностью.

В разделе 2 рассматривается моделирование метеорологических полей на основе полной (негидростатической) системы уравнений атмосферной динамики. Полученные поля используются как фон, на котором происходит распространение аэрозолей. Раздел 3 посвящен переносу примеси в атмосфере при больших числах Рейнольдса, и алгоритм расчета здесь основан на подходе Петрова–Галеркина. Наконец, в разделе 4 приведены результаты некоторых предварительных численных экспериментов, причем как для простой области, так и для случая ортографии с большими пространственными градиентами. Имея в виду применение рассматриваемых моделей для моделирования переноса аэрозолей в условиях городских застроек, в разделе 4 приведен также пример расчета атмосферных характеристик над областью повышенной шероховатости.

2. Расчет метеорологического фона

Мезомасштабная (внешняя) модель основана на полной (негидростатической) системе уравнений атмосферной динамики:

$$\frac{dU}{dt} + \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial(G^{13}P)}{\partial \eta} = f_1(V - V_g) - f_2W + R_u,$$

$$\frac{dV}{dt} + \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial(G^{23}P)}{\partial \eta} = f_1(U - U_g) + R_v,$$

$$\frac{dW}{dt} + \frac{1}{G^{1/2}} \frac{\partial P}{\partial \eta} + \frac{gP}{C_s} = f_2U + g \frac{G^{1/2} \bar{\rho} \theta'}{\bar{\theta}} + R_w,$$

$$\frac{d\theta}{dt} = R_\theta, \quad \frac{ds}{dt} = R_s,$$

$$\frac{1}{C_s} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(G^{13}U + G^{23}V + \frac{1}{G^{1/2}} W \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{G^{1/2} \bar{\rho} \theta'}{\bar{\theta}} \right).$$

Мезомасштабная модель дискретизируется конечными разностями и использует следующую замену переменных, которая трансформирует область со сложной орографией в область простой структуры:

$$\eta = H(z - z_s)/(H - z_s),$$

z_s – высота орографии; H – высота области моделирования, $H = \text{const}$.

$$G^{1/2} = 1 - z_s/H, \quad G^{13} = \frac{1}{G^{1/2}} \left(\frac{\eta}{H} - 1 \right) \frac{\partial z_s}{\partial x},$$

$$G^{23} = \frac{1}{G^{1/2}} \left(\frac{\eta}{H} - 1 \right) \frac{\partial z_s}{\partial y}.$$

Микромасштабная (внутренняя) модель дискретизируется конечными элементами и не использует приведенную выше замену переменных.

В уравнениях $U = \bar{\rho}u$, $V = \bar{\rho}v$, $W = \bar{\rho}w$, $P = p'$, где p' , θ' – отклонения от основного состояния давления \bar{p} и потенциальной температуры \bar{q} ; s – удельная влажность; C_s – скорость звуковой волны; u_g , v_g – компоненты геострофического ветра, представляющие синоптическую часть давления; f_1, f_2 – параметры Кориолиса; g – гравитационная постоянная.

Члены $R_u, R_v, R_w, R_\theta, R_s$ описывают процессы подсеточного масштаба. Для параметризации турбулентности используем простую схему, основанную на вычислении пути смещения Блакадара [2]. Оцениваются обычные логарифмические профили ветра между поверхностью и первым слоем в атмосфере. В качестве стандартной шероховатости берем 0,1 м. Мезомасштабная модель рассматривает городские застройки как участки повышенной шероховатости (см. пример расчета в разделе 4).

Не останавливаясь на деталях постановки и численной реализации уравнений атмосферной динамики (см. [5–6]), перейдем к алгоритму распространения аэрозолей.

3. Моделирование распространения аэрозолей

Уравнение конвекции-диффузии для переноса субстанции в атмосфере имеет следующий вид ([1]):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \nabla (\mathbf{K} \nabla \Phi - \mathbf{v} \Phi) - \lambda \Phi + f. \quad (1)$$

Здесь $\Phi(\mathbf{x}, t)$ – концентрация аэрозоля; $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ – тензор дисперсии; $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ – скорость ветра; $\lambda(\mathbf{x}, t)$ описывает химические реакции; $f(\mathbf{x}, t)$ – член источника или стока; $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^d$, $d = 1, 2, 3$.

Дискретизируем эту задачу так называемым стандартным методом Галеркина, иногда называемым также методом Бубнова–Галеркина (см., например, [8]). Этот метод дает хорошие численные результаты при умеренных числах Рейнольдса. Однако для больших чисел Рейнольдса, т.е. для случая, когда адвекция сильно доминирует над диффузией, результаты, полученные стандартным методом Галеркина, являются сильно осциллирующими и имеют малое отношение к точному решению. Одним из средств подавления нежелательных осцилляций является метод Петрова–Галеркина. Для простоты обозначений изложим этот метод в упрощенной постановке. Будем считать, что

процесс переноса аэрозолей стационарен и химические реакции отсутствуют. Более того, предположим что $\mathbf{K} = \text{const}$, $\mathbf{K} \leq 1$ и что вектор скорости \mathbf{v} постоянен и нормализован, т.е. $|\mathbf{v}| = 1$. Подчеркнем, однако, что следующий анализ может быть легко обобщен на общий случай.

Обозначим $\nabla_{\mathbf{v}} \Phi = v_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} + v_z \frac{\partial \Phi}{\partial z}$ производную в

направлении \mathbf{v} . Пусть граница области Γ состоит из частей $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4$ (см. далее пример расчета в разделе 4). Тогда наша задача принимает форму

$$\begin{aligned} -K \Delta \Phi + \nabla_{\mathbf{v}} \Phi &= f, \\ \Phi &= \Phi^D \text{ на } \Gamma_2, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial n} &= 0 \text{ на } \Gamma_1, \Gamma_3, \Gamma_4. \end{aligned} \quad (2)$$

Используем стандартные обозначения для скалярного произведения

$$(\Phi, \Psi) = \int_{\Omega} \Phi \Psi \, d\Omega, \quad (\nabla \Phi, \nabla \Psi) = \int_{\Omega} \nabla \Phi \nabla \Psi \, d\Omega.$$

Умножая это уравнение на поверочную функцию $\psi + \delta \nabla_{\mathbf{v}} \psi$, где $\psi = 0$, на Γ_2 и интегрируя по Ω , получаем

$$K(\nabla \Phi, \nabla \Psi) - K \delta (\Delta \Phi, \nabla_{\mathbf{v}} \Psi) + (\nabla_{\mathbf{v}} \Phi, \Psi + \delta \nabla_{\mathbf{v}} \Psi) = (f, \Psi + \delta \nabla_{\mathbf{v}} \Psi), \quad (3)$$

где член $K(\Delta \Phi, \Psi)$ был проинтегрирован по частям; δ – положительный параметр, который будет определен ниже. Для формулировки дискретного аналога этого уравнения заменяем, подобно стандартному методу Галеркина, Φ и Ψ на кусочно-линейные аппроксимации $\bar{\Phi}$ и $\bar{\Psi}$, которые интерполируют точно в узлах триангуляции.

Поскольку $\bar{\Phi}$ кусочно-линейна, то $\Delta \bar{\Phi} = 0$ внутри каждого треугольника Ω_e и поэтому $(\Delta \bar{\Phi}, \nabla_{\mathbf{v}} \bar{\Psi}) = 0$. Опуская для удобства черточки сверху, сводим (3) к форме

$$K(\nabla \Phi, \nabla \Psi) + \delta (\nabla_{\mathbf{v}} \Phi, \nabla_{\mathbf{v}} \Psi) + (\nabla_{\mathbf{v}} \Phi, \Psi) = (f, \Psi + \delta \nabla_{\mathbf{v}} \Psi). \quad (4)$$

Отличие от стандартного метода Галеркина состоит в наличии членов $\delta (\nabla_{\mathbf{v}} \Phi, \nabla_{\mathbf{v}} \Psi)$ и $\delta (f, \nabla_{\mathbf{v}} \Psi)$. Интегрируя член $\delta (\nabla_{\mathbf{v}} \Phi, \nabla_{\mathbf{v}} \Psi)$ формально по частям, получаем $-\delta (\nabla_{\mathbf{v}} \Phi, \Psi)$ ($\nabla_{\mathbf{v}} \Phi$ – вторая производная от Φ в направлении \mathbf{v}). Это означает, что можно интерпретировать метод Петрова–Галеркина как добавление искусственной вязкости величины δ в направлении по потоку \mathbf{v} . Член $\delta (\nabla_{\mathbf{v}} \Phi, \nabla_{\mathbf{v}} \Psi)$ также численно дискретизируется аналогичным образом как диффузионный член в стандартном методе Галеркина. Дальнейшие вычисления проводятся так же, как и в стандартном методе Галеркина.

Наконец, величина параметра δ задается как $\delta = 0(h/\nabla)$, где h – типичный размер ячейки. Численные эксперименты показали, что значения $\delta = ch/v$, где $0,2 \leq c \leq 1,5$, дают вполне удовлетворительные результаты.

Итак, подчеркнем основное различие между методом Петрова–Галеркина и стандартным методом Галеркина. Метод Петрова–Галеркина основан на использовании поверочных функций вида $\Psi + \delta \nabla_{\mathbf{v}} \Psi$, где Ψ кусочно-линейна и непрерывна. В частности, поверочные функции являются разрывными из-за разрывности члена $\delta \nabla_{\mathbf{v}} \Psi$. Это означает, что поверочные функции принадлежат пространству, кото-

рое отличается от пространства пробных функций, где ищется дискретное решение Φ . В стандартном методе Галеркина пространства прстых и поверочных функций совпадают.

4. Примеры расчетов

Наши первые численные эксперименты проведены для регулярной области, и цель состоит в демонстрации преимуществ метода Петрова–Галеркина.

Рассмотрим задачу

$$-K\Delta\Phi + v_x \frac{\partial\Phi}{\partial x} + v_y \frac{\partial\Phi}{\partial y} = 0, \quad \Phi = \Phi^D \quad \text{на } \Gamma_2,$$

$$\Phi = 0 \quad \text{на } \Gamma_1, \Gamma_4, \quad \frac{\partial\Phi}{\partial n} = 0 \quad \text{на } \Gamma_3,$$

где $K = 10^{-3}$; $\mathbf{v} = (v_x, v_y) = (\cos 10^\circ, \sin 10^\circ)$; $\Omega = \{(x, y): 0 < x, y < 1\}$ – единичный квадрат и $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4$ – дно, левая граница, верх, правая граница Ω соответственно. Далее, $\Phi^D = 0$ при $x = 0, 0 < y < 1/2$; $\Phi^D = 1$ при $x = 0, 1/2 < y < 1$. Конечно-элементная сетка состоит из 512 треугольных элементов и равномерна как по горизонтали, так и по вертикали.

Точное решение обладает как внутренним, так и пограничным слоем на Γ_4 . Оказывается, что качество численного решения зависит существенно от выбора параметра δ . Рис. 1 соответствует $\delta = 1$. Расчеты показывают, что решение становится более гладким, если вводить больший коэффициент искусственной вязкости, но в случае слишком большой вязкости решение теряет информативность.

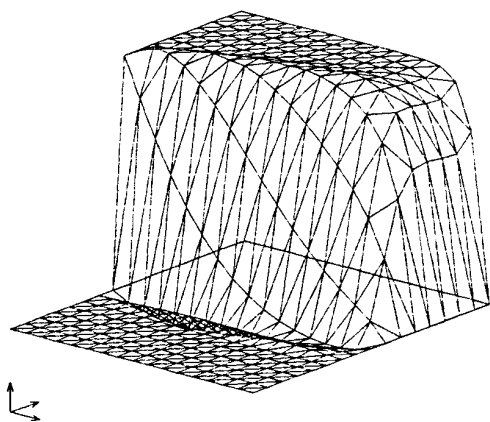


Рис. 1. Концентрация аэрозоля в методе Петрова–Галеркина

Мезомасштабная модель учитывает городские застройки как участки повышенной шероховатости. Рассмотрим результаты моделирования типичной ситуации. Остров шероховатости 1 м в центре области 10×10 км. Вершина области 5 км. Геострофический поток распространяется с запада на восток со скоростью 5 м/с. В качестве основного состояния принимается стандартная атмосферная стратификация с градиентом 3,5 К/км. Выше 1500 м расположен поглощающий слой. Расчетная сетка состоит из $31 \times 31 \times 16$ точек с горизонтальным размером сетки 333 м и переменным вертикальным размером. На рис. 2 приведено западно-восточное сечение поля вертикальной скорости через центр острова. Виден относительно плоский слой подъема воздуха над об-

ластью шероховатости. Картина потока находится в качественном согласии с теоретическими представлениями [9].

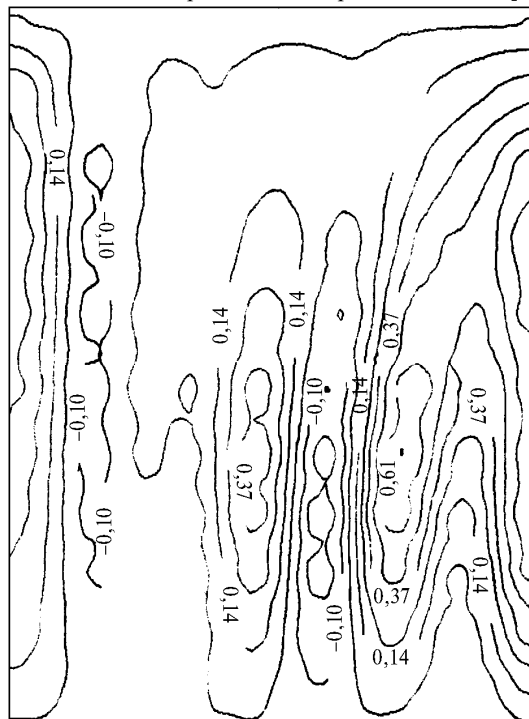


Рис. 2. Вертикальная скорость при повышенной шероховатости

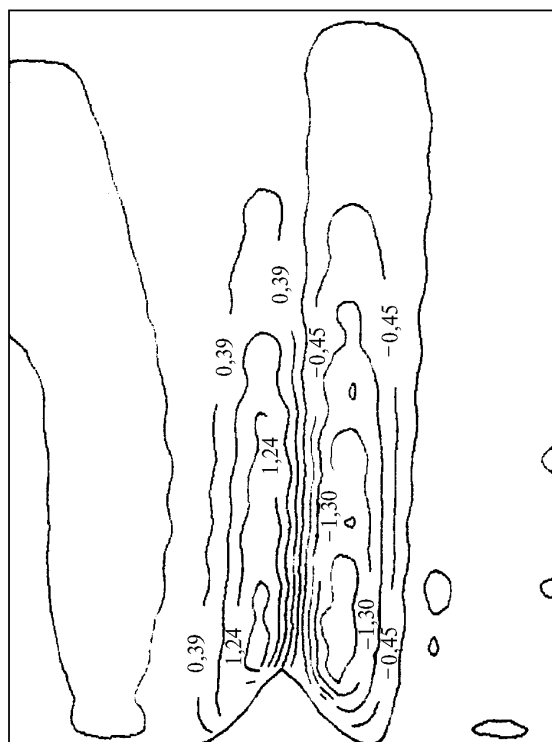


Рис. 3. Вертикальная скорость при повышенной орографии

Приведем пример эксперимента с внутренней моделью. На рис. 3 представлено поле вертикальной скорости установившегося течения над двумерным препятствием вида $h = h_0/(1 + x^2/a^2)$. Здесь h_0 и $a = 500$ м. Размеры облас-

ти 7×5 км, скорость внешнего потока $u_g = 5$ м/с, $v_g = 0$, сетка 31×16 состоит из четырехузловых конечных элементов, которые равномерны по горизонтали и сгущаются к поверхности. В верхней части области введен демпфирующий слой для уменьшения отражения волн с верхней границы. Стратификация основного состояния описывается стандартной атмосферой с градиентом $3,5$ К/км.

Общая структура потока соответствует имеющимся данным измерений [10].

1. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 319 с.

2. Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Н.: Наука, 1985. 256 с.
3. Eichhorn J., Schrodin R., Zdankowski W. // Beitr. Phys. Atmosph. 1988. V. 61. N 3. P. 187–203.
4. Clark T. // J. Comp. Phys. 1977. V. 24. P. 186–215.
5. Юдин М.С., Вильдероттер К. // Оптика атмосферы и океана. 1998. Т. 11. N 10. С. 11–14.
6. Yudin M.S. // Bull. Nov. Comp. Center, Num. Model. In Atmosph. 1995. V. 2. P. 101–107.
7. Brooks A., Hughes T. // Comput. Meth. Appl. Mech. Engng. 1982. V. 32. P. 199–259.
8. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977. 316 с.
9. Bornstein R.D. // J. Appl. Met. 1975. V. 14. P. 1459–1476.
10. Clark T., Gall R. // Mon. Wea. Rev. 1982. V. 110. N 7. P. 766–791.

M.S. Yudin, K. Wilderotter. Simulation of Small-Scale Atmospheric Aerosol Transfer.

Two numerical models for transfer of aerosols in urban conditions are discussed. The microscale model accounts for the shapes of buildings and city canyons using the finite elements. The mesoscale model is based on finite differences and takes into account the structure of the Earth's surface with the help of the roughness length concept. The results of model calculations for different types of surface inhomogeneities are presented. A qualitative agreement with theory and measurement data is obtained.