

一个对流边界层中的随机扩散模式*

李 宗 恺

杜 曙 明

(南京大学大气科学系, 南京 210008)

(南京气象学院, 南京 210044)

提 要

通过对对流边界层(CBL)湍流结构的分析, 首次提出用两种不同尺度的湍流模拟CBL中的铅直扩散. 在此基础上发展了一个随机扩散模式, 并用它模拟了典型对流条件下两种高架连续点源的扩散. 与Willis水槽模拟和Lamb等数值模拟以及CONDORS计划外场试验的结果的比较表明, 本模式能成功地模拟CBL中的横向积分浓度. 与其它数值模式相比, 还具有输入参数少、计算量极小和更加简单实用的优点.

关键词: 对流边界层; 大涡; 铅直扩散.

一、引 言

最近20年来, 对流边界层以及其中的湍流扩散日益引起人们的广泛兴趣. 自Ceardorff^[1]提出对流尺度参数的概念以后, 大大加速了对CBL的研究和认识. 通过对一些外场试验资料的分析, 加深了对CBL中铅直湍流结构的了解.

文献[1-2]的水槽试验表明, 在均匀平坦下垫面上, 高架连续点源的浓度轴线向下倾斜. Lamb^[3-4]用Deardorff^[5]大涡模式的结果作为输入, 其数值模拟的结果与水槽试验基本一致. 其中最引人注目的, 是高架连续点源的地面最大横向积分浓度

$$\int_{-\infty}^{+\infty} cdy = 0.484 \frac{Q}{Uz_i} \left(1 + \frac{z_s}{z_i} \right), \quad (1)$$

式中, Q 为源强, U 为平均风速, z_i 为对流混合层厚度, z_s 为源高. 而传统的高斯模式的相应值为 $0.484Q/(Uz_i)$. 当有效源高为 $(1/2)z_i$ 时, (1)式的结果约等于高斯模式的2倍, 地面最大浓度出现的距离也更近. 为进一步研究CBL中铅直扩散而设计的CONDORS外场试验研究计划的初步结果表明, 虽然实际大气的状况远比物理和数值试验的模型复杂而多样, 但仍能证实前述CBL中铅直扩散的基本特征是正确的^[6].

另一种研究途径是通过寻求CBL中铅直湍流的概率分布函数来模拟扩散^[7]. 这种用解析方法建立的模式在实际应用中更简单有效, 但是用它们模拟复杂地形和非定常湍流却十分困难, 其进一步发展将受到一定的限制.

80年代以来, 粒子随机扩散模式日益被证明为具有广泛适用范围的扩散模式. 在非

1992年1月21日收到, 4月14日收到修改稿.

* 国家自然科学基金资助项目.

均匀、非定常和非高斯分布的复杂流场中,湍流扩散的 Taylor 统计理论、相似理论和 K 理论模式已不再成立或难以奏效,而粒子随机扩散仍能进行有效的模拟;此外,它还可以用于计算离源很近,乃至粒子行程时间远小于拉格朗日时间尺度范围内的扩散,而 K 模式对此却无能为力;与通过间接参数化方法确定扩散速率以及闭合方程的欧拉模式相比,它的拉格朗日性质更直接地揭示了湍流扩散过程的本质。

为此,我们发展了一个粒子随机扩散模式,用来模拟 CBL 中的铅直扩散。为了能与水槽试验以及数值模拟的结果^[6,3]作比较,作为第一步,仅考虑均匀平坦下垫面上的定常扩散。模式设计要求既有较好的模拟效果,又尽可能简单实用。通过对 CBL 中湍流结构的分析,我们认为模式应能揭示铅直湍流的大涡结构、非高斯分布和明显区别于大涡的小尺度湍流特征,并尽可能简化模式的其余部分。为此,将铅直湍流分解为两个部分:一部分是大涡,它由上升暖流(thermals)和补偿的下沉气流(downdrafts)组成,这类大涡有足够长的时间尺度,以致进入其中的粒子将随之上升至 CBL 顶或下沉至地面^[4,7-8]。另一部分是小湍流,它在大涡的背景上叠加小尺度扩散,仍是重要的组成部分,具有较强的随机性。本模式中,大涡的铅直速度由 CBL 参数化方案给出,小涡的速度,则由 Langevin 方程增加湍流切变订正后解得的 Monte Carlo 关系式表示。对高架连续点源的模拟结果表明,模式能够成功地模拟 CBL 中的横向积分浓度。与其它数值模式相比,还具有输入参数少、计算量很小和更加简单实用的优越性。

二、模 式

在 CBL 中,横风向扩散仍遵循高斯率^[9],可以按传统的方法计算。因此本文仅探讨铅直扩散,只需计算横风向积分浓度的分布。取 x 轴与平均风方向一致,于是归结为 $x-z$ 平面上的二维问题。

按照粒子随机扩散模式的原理,需要计算许多个粒子的运行轨迹,其中任意一个粒子的轨迹方程为

$$\begin{cases} x(t+\Delta t) = x(t) + u(t)\Delta t, \\ z(t+\Delta t) = z(t) + w(t)\Delta t, \end{cases} \quad (2)$$

式中, $u(t)$, $w(t)$ 分别为粒子在 x 和 z 方向的速度, Δt 为计算轨迹所取的时间步长。

如前所述,针对 CBL 中铅直湍流结构的特征,可将 $w(t)$ 分解为两部分:

$$w(t) = w_L(t) + w'(t) \quad (3)$$

$w_L(t)$ 和 $w'(t)$ 分别为大涡和小涡的铅直速度。于是(2)式可改写为

$$\begin{cases} x(t+\Delta t) = x(t) + u(t)\Delta t, \\ z(t+\Delta t) = z(t) + [w_L(t) + w'(t)]\Delta t. \end{cases} \quad (4)$$

此即为本模式所取的粒子轨迹方程,它的求解取决于如何确定 $u(t)$, $w_L(t)$ 和 $w'(t)$ 。

1. 风速

严格地说, $u(t)$ 应是粒子在 t 时刻顺风向瞬间风速,按照一般的近似方法,可假定 $u = \bar{u}(z)$, 且有:

$$\bar{u}(z) = \begin{cases} \frac{u_*}{k} \left[\ln \frac{z}{z_0} - \psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right] & (\text{近地层}), \\ U & (\text{近地层以上}). \end{cases} \quad (5)$$

2. 大涡铅直速度

大涡的铅直速度由上升暖流 w_T 和下沉气流 w_D 组成. Lenschow 和 Stephens^[9, 10] 利用 AMTEX 研究计划获得的资料, 仔细分析了 CBL 中铅直气流的结构, 发现上升暖流占全部观测记录时间的 20%—30%, 并且有

$$w_T = 1.0 w^* \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(1 - 1.1 \frac{z}{z_i} \right), \quad (6)$$

式中, $w^* = (H^* z_i)^{1/3}$ 是对流速度尺度, $H^* \simeq \frac{g}{T} \overline{w' T'}$ 是近地面浮力加速度的铅直湍流通量, $\overline{w' T'}$ 是铅直速度和温度的协方差. 另一些研究则给出 w_T 占据的面积约为 40%—45%. 考虑到文献 [9—10] 的分析中忽略了尺度小于 25m 的上升暖流, 并且根据 Lamb^[3] 对大涡模拟结果的分析, 我们认为取 w_T 占据的成数 $p=0.4$ 是合适的, 并可忽略 p 随高度的变化.

另一方面, 由质量守恒原理应有

$$p w_T + (1-p) w_D = 0. \quad (7)$$

得

$$w_D = -\frac{2}{3} w^* \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(1 - 1.1 \frac{z}{z_i} \right). \quad (8)$$

通过对 (6), (8) 二式合理性的进一步分析, 发现由它们决定的铅直速度偏小. 例如, 由 (8) 式

$$\int_0^{0.25z_i} w_D dz / 0.25z_i = -0.2655 w^*, \quad (9)$$

由此可得当源高 $z_s = 0.25z_i$ 时, 地面最大浓度出现的无因次距离

$$x = \frac{x w^*}{U z_i} = 0.94. \quad (10)$$

这个数值明显偏大, 即由 (6), (8) 二式给出的 w_T 和 w_D 偏小. 因此我们取

$$w_L = \begin{cases} c_1 w^* \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(1 - 1.1 \frac{z}{z_i} \right) & (\text{上升暖流}), \\ -\frac{2}{3} c_1 w^* \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(1 - 1.1 \frac{z}{z_i} \right) & (\text{下沉气流}). \end{cases} \quad (11)$$

c_1 为待定的大于 1 的常数. (11) 式仅给出了大涡的铅直速度分布. 由于求解的是定常问题, w_T 和 w_D 水平分布的不均匀性仅表现在它们所占空间面积的权重不同. 在计算的粒子

数足够多以后,可得到定常的浓度分布.

3. 小涡铅直速度

在 CBL 中,小尺度湍流仍可用 Monte Carlo 方法来模拟.与一般 Langevin 方程导得的 Monte Carlo 关系式不同,此时需要考虑速度方差 σ_w^2 铅直切变引起的附加力对粒子的作用.于是,小尺度铅直湍流速度由下式表示^[11-12]:

$$w'(t+\Delta t) = w'(t)R_L(\Delta t/T_{Lz}) + \sigma_w' [1 - R_L^2(\Delta t/T_{Lz})]^{1/2} \zeta_t \\ + [1 - R_L(\Delta t/T_{Lz})] \bar{w}, \quad (12)$$

式中, σ_w' 是 w' 的标准差, ζ_t 是平均值为零、标准差等于 1 的高斯随机数, $R_L(\Delta t/T_{Lz})$ 是 $w'(t)$ 的拉格朗日相关系数, T_{Lz} 是拉格朗日时间尺度.研究表明,取

$$R_L(\Delta t/T_{Lz}) = \exp(-\Delta t/T_{Lz}), \quad (13)$$

(12) 式中的 $\bar{w}$ 是粒子的飘移速度. Wilson 等人^[13] 及文献 [12] 证明,当流场中存在速度方差的切变时,将产生作用于粒子的附加力,由此导致粒子的飘移速度为^[14]

$$\bar{w}(t) = T_{Lz} \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z}. \quad (14)$$

上述研究表明,考虑 $\bar{w}(t)$ 的作用以后可以明显改进模拟效果,我们的模拟也证明了这个结论.为完成 (12) 式的计算,尚需以下参数:铅直速度方差 σ_w^2 , 小尺度湍流铅直速度标准差 σ_w' 和拉格朗日时间尺度 T_{Lz} .

在 CBL 中,铅直湍流具有明显的不对称和非高斯分布性质,文献 [9] 给出:

$$\sigma_w^2 = \begin{cases} 3.2w^* \left(\frac{z}{z_i} \right)^{2/3} \left[1 - 0.75 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/2} \right]^2 & (\text{上升暖流中}), \\ 2.4w^* \left(\frac{z}{z_i} \right)^{2/3} \left[1 - 0.77 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/4} \right]^2 & (\text{下沉气流中}). \end{cases} \quad (15)$$

另一方面,由大涡及小尺度湍流作用的叠加原理有:

$$\sigma_w'^2 = c_2(\sigma_w^2 - \sigma_{wL}^2). \quad (16)$$

c_2 是待定系数,当 w 及其分量均为高斯分布时,其理论值为 1;此外,考虑到 (11) 及 (15) 式均非严格的理论等式,设置 c_2 还可以适当改善模式效能.对于给定的计算条件和高度, w_L 的值即为大涡铅直速度的离均差,是一个确定的值,故 $\sigma_{wL}^2 = w_L^2$.

CBL 中大涡的拉格朗日时间尺度的概量为 z_i/w^* (或 z_i/σ_w), 由因次分析可得小涡的时间尺度为

$$T_{Lz} = c_3 \frac{D}{\sigma_w}. \quad (17)$$

c_3 为待定常数; D 为上升暖流的平均直径,由文献 [9] 得

$$D = 0.16z_i \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(1 - 0.25 \frac{z}{z_i} \right). \quad (18)$$

在 CBL 中部, $D \sim 0.1z_i$, $\sigma_w \sim 0.67w^*$, 于是可得 $T_{Lz} \sim 0.15 z_i/w^*$. 可见小涡的

时间尺度约为大涡的 1/10.

4. 横风向积分浓度

如前所述, 本文的目的是研究 CBL 中的铅直扩散, 故仅需寻求粒子的横风向积分浓度 C_y 的分布. 设浓度为 C , 则

$$C_y(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} C(x, y, z) dy. \quad (19)$$

取数值计算的水平格距为 Δx , 铅直格距为 Δz , 当 $\Delta t \ll \Delta x/u$ 时, 我们有

$$C_y = C_{ij} = \frac{Q N_{ij} \Delta t}{N \Delta x_i \Delta z_j}, \quad (20)$$

式中, Q 为源强, N 为计算中释放的粒子总数, N_{ij} 是出现在第 i 行距离和第 j 列高度的所有网格中(横风向)粒子数之和.

为了便于和其它模拟结果的比较, 我们计算无因次横向积分浓度

$$C_y = \frac{C_y U z_i}{Q} = \frac{N_{ij} \Delta t U z_i}{N \Delta x_i \Delta z_j}. \quad (21)$$

在完成了 N 个粒子轨迹的计算以后, 不难由上式求得 C_y 的分布.

三、模式计算与结果分析

为了与水槽试验及其它模拟结果比较, 我们在模式计算中取 CBL 的典型值, 即 $z_i = 1000\text{m}$, $w^* = 2\text{m/s}$, $U = 5\text{m/s}$. 这些数值显然满足 $1.2w^* < U < 6w^*$ 的条件. 近地层的风速按(5)式计算. 模拟的水平范围为无因次距离 $x = xw^*/(z_i U) \leq 4.0$, 水平及铅直网格取等间距 $\Delta x = 100\text{m}$, $\Delta z = 25\text{m}$.

粒子轨迹计算的时间步长 Δt 应满足

$$T_k \ll \Delta t \ll T_L. \quad (22)$$

T_k 是粒子加速度保持相关的时间尺度, 其量级与 Taylor 拉格朗日自相关微尺度相当; T_L 是湍流的拉格朗日时间尺度. 本模式取 $\Delta t = 10\text{s}$ 是合适的. 此外, 也满足(20)式需要 $\Delta t \ll \Delta x/U$ 的条件.

为了尽可能简化模式计算, 假设粒子在地面和混合层顶全反射. 这个假定对 CBL 中部及下部的浓度分布不会引起明显误差^[7].

前节的待定系数可通过数值试验确定. 首先, c_1 主要与大涡的作用有关, 根据源高与地面最大浓度合理位置之间的关系, 得到 $c_1 = 1.5$. 其次, 应用 $x = 4$ 时粒子应趋于均匀分布这一边界条件, 得到 c_2 和 c_3 的最佳值为 $c_2 = 1.5$, $c_3 = 1.0$. 通过本文对不同高度连续点源的模拟, 以及对地面源扩散的模拟, 均获得比较理想的结果. 这说明以上系数值是稳定的, 具有普适性.

按照上述条件, 我们计算了源高 $z_s = 0.25z_i$ 和 $z_s = 0.5z_i$ 两种情形. 每个源释放的粒子总数为 10^5 个. 由于模式设计简单合理, 在 Super Sync 微机上仅需 2 小时即可完成一个源的计算.

图1是 $z_s=0.25z_i$ 时的计算结果, 图中给出了 $x-z$ 平面上无因次横风向积分浓度 C_r 的等值线. 其中, 图1(a)是本文模式计算结果, (b)由Willis和Dearcloff水槽试验所得, (c)是Lamb数值模拟的结果. 由图1可见, 三种不同方法模拟的结果大体相符, 尤其在CBL中、下部, 相互之间基本一致. 本模式能够模拟高架连续点源浓度轴线下倾的特征, 其地面最大浓度的数值和位置与另两种方法的结果非常接近.

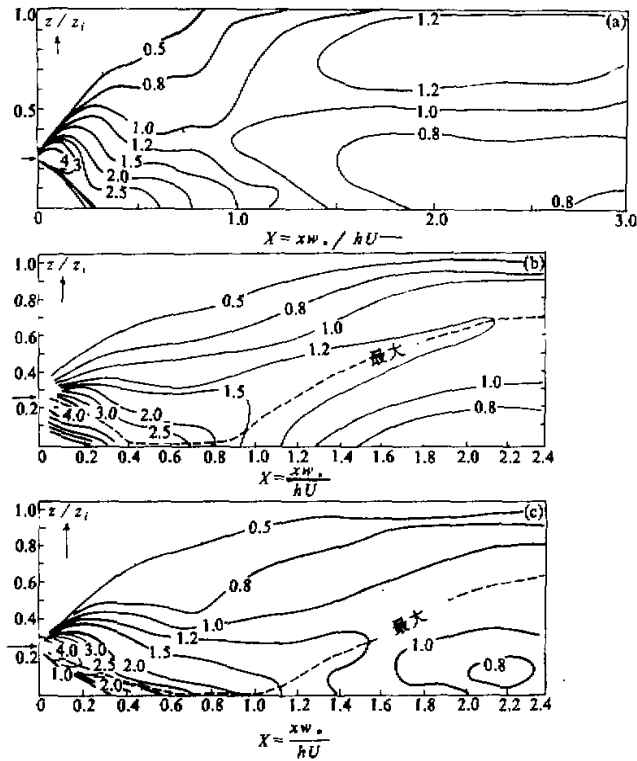


图1 无因次横风向积分浓度

(a) 本模式, (b) 水槽模拟, (c) 大涡数值模拟

图1(a)与另两个图形的差别主要在CBL上部, 特别是在 $x > 1.0$ 的范围内, 我们的简单模式给出的浓度值偏大. 这可能由以下两方面的原因造成: 首先, 模式假定CBL顶是刚边界, 正如文献[7]所指出, 实际上应是软边界; 其次, 由观测资料拟合的(6)式可能还不足以代表上升暖流, 特别是上部暖流的实际情况. 此外, Sun和Chang^[15]用一个高阶闭合的扩散模式模拟CBL中的铅直扩散, 他们得到了一个与图1(a)相似的结果, 即在 $z/z_i > 0.8$ 的部位出现了一个高浓度中心, 并且一直延伸到 $x > 2.5$ 的范围内. 他们将此解释成是由于CBL上部混合不充分所造成.

虽然本模式对CBL上部的模拟尚不理想, 但从环境应用的角度来看, 主要关心的是较低层的浓度场, 特别是地面浓度的分布. 从这个意义上来考虑, 我们的简单模式是

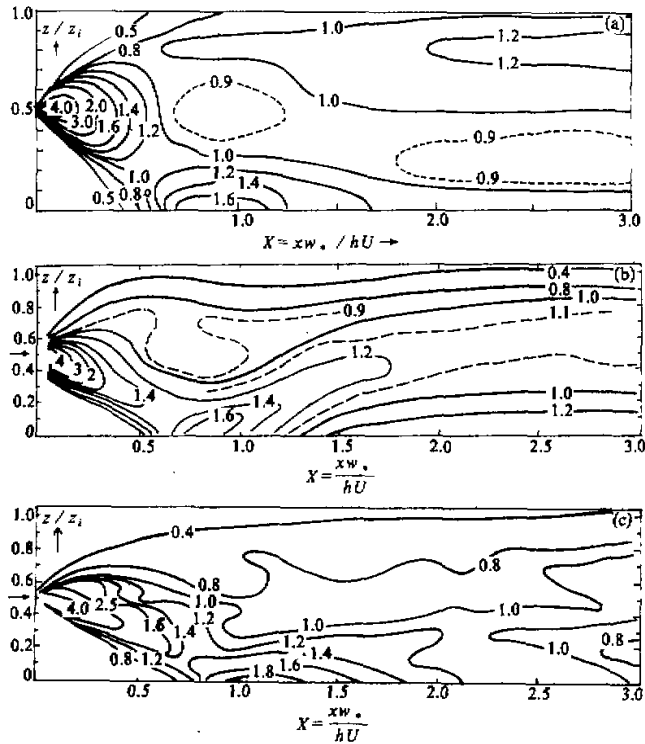


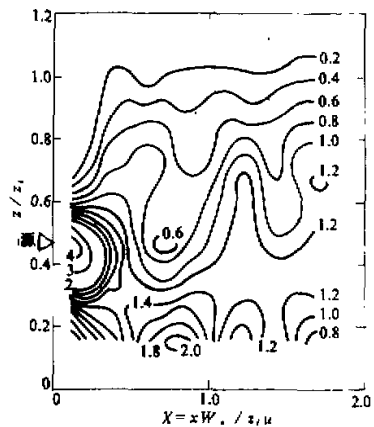
图2 无因次横风向积分浓度

(a) 本模式, (b) 水槽模拟, (c) Lamb 大涡数值模拟, $z_0 = 0.5z_i$

相当成功的。将上边界处理成软边界并考虑顶部的夹卷显然会改进上部的模拟, 但势必使模式复杂化, 且不会明显改善模式的实际应用效果, 这不符合我们发展这个模式的宗旨。

图2是源高 $z_s = 0.5z_i$ 的情形, (a), (b), (c), 分别是本模式、水槽试验和Lamb模拟的结果。比较分析的结论与 $z_s = 0.25z_i$ 的情形基本相同, 在此不再赘述。

图3是CONDORS外场试验得到的 C_2 等值线图, 源高 $z_s = 0.5z_i^{116}$ 。此图所示的结果与图2大体相符, 但再一次显示有成对出现的高、低浓度中心。在 $x = 0.8$ 处, 高中心在 $z/z_i = 0.15$, 低中心在 $z/z_i = 0.5$ 处; 在 $x = 1.8$ 的位置, 高、低中心分别在 $z/z_i = 0.7$ 及 0.2 处。对照图1和图2可见, 我们的简单模式也给出了这样的特征, 但在水槽试验及Lamb数值模拟的结果中均未出现, 对这种现象还需作进一步的研究。

图3 CONDORS 外场试验结果, $z_s = 0.5z_i$

四、结 论

在均匀平坦下垫面上, CBL 中的铅直湍流不是高斯分布的, 由此导致高架连续点源的浓度轴线下倾, 地面源浓度轴线上倾, 并且浓度的空间分布以及地面最大浓度的数值和位置均与高斯模式的结果有明显差别; 另一方面, 传统的 K 模式也不适用于 CBL 中的铅直扩散。目前已经发展了一些模拟 CBL 中铅直扩散的数学模式, 其中, 解析的 PDF 模式对复杂问题的模拟将遇到困难, 而复杂的大涡模拟和高阶闭合数值模式的实际应用也受到很大限制。

本文的研究表明, 只要能充分反映 CBL 中铅直湍流的主要特征, 用简单的粒子随机扩散模式也能成功地模拟 CBL 中的铅直扩散。用我们的模式计算了两种不同源高烟流的横风向积分浓度分布, 在 CBL 中, 下部与水槽试验和复杂数值模式的结果十分接近, 而模式需要的输入参数少、计算量极小, 更适合环境应用的需要。在 CBL 上部, 由于模式对上边界的处理比较简单, 计算结果与实况有一定差异, 但却能模拟出 CBL 上部的高浓度中心, CONDORS 计划的外场试验以及高阶扩散模式也发现有这样的现象。

参 考 文 献

- [1] Willis, G. E. and Deardorff J. W. 1978, A laboratory study of dispersion from an elevated source in a convective mixed layer, *Atmospheric Environment*, **12**, 1305-1313.
- [2] Willis, G. E. and Deardorff J. W. 1981, A laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convective mixed layer, *Atmospheric Environment*, **15**, 109-117.
- [3] Lamb, R. G., 1978, A numerical simulation of dispersion from an elevated point source in the convective boundary layer, *Atmospheric Environment*, **12**, 1279-1304.
- [4] Lamb, R. G., 1982, Diffusion in the convective boundary layer, in: *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling* (edited by Nieuwstadt F. T. M. and van Dop H.), pp. 159-229, D. Reidel, Boston.
- [5] Deardorff, J. W., 1974, Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary-layer, *Boundary-layer Meteorology*, **7**, 81-106.
- [6] Eberhard, W. L., Moninger W. R. and Briggs G. A., 1988, Plume dispersion in the convective boundary layer, Part I: CONDORS field experiment and example measurements, *J. Appl. Meteor.*, **27**, 599-616.
- [7] Li, Z. and Briggs G. A., 1988, Simple PDF models for convective driven vertical diffusion, *Atmospheric Environment*, **22**, 55-74.
- [8] Kaimal, J. C., Wyngaard J. C., Haugen D. A., Cote O. R., Izumi Y., Caughey S. J. and Readings C. J., 1976, Turbulent structure in the convective boundary layer, *J. Atmos. Sci.*, **33**, 2152-2169.
- [9] Lenschow, D. H. and Stephens P. L. 1980, The role of thermals in the convective boundary layer, *Boundary-layer Meteorology*, **19**, 509-532.
- [10] Lenschow, D. H. and Stephens P. L. 1982, Mean vertical velocity and turbulence intensity inside and outside thermals, *Atmospheric Environment*, **16**, 761-764.
- [11] Reid, J. R. 1979, Markov-chain simulations of vertical dispersion in the neutral surface layer for surface and elevated releases, *Boundary-layer Meteorology* **16**, 3-22.
- [12] Legg, B. J. and Raupach M. R. 1982, Markov-chain simulation of particle dispersion in inho-

- ogeneous flows: the mean drift velocity induced by a gradient in eulerian velocity variance. *Boundary-layer Meteorology*, **24**, 3-13.
- [13] Wilson, J. D., Thurtell G. W. and Kidd G. E. 1981, Numerical simulation of particle trajectories in inhomogeneous turbulence. II: systems with variable turbulent velocity scale. *Boundary-layer Meteorology*, **21**, 423-441.
- [14] Wilson, J. D., Legg B. J. and Thomson D. J. 1983, Calculation of particle trajectories in the presence of a gradient in turbulent velocity variance. *Boundary-layer Meteorology*, **27**, 163-169.
- [15] Sun, W. Y. and Chang C. Z. 1986, Diffusion model for a convective layer. part II: plume released from a continuous point source. *J. Appl. Meteor.*, **25**, 1454-1463.
- [16] Moninger, W. R., Eberhard W. L., Briggs G. A., Kropfli R. A. and J. C., 1983, Simultaneous radar and lidar observations of plumes from continuous point sources, *Preprint, Twenty-first Radar Meteorology Conference*, Edmonton, Amer. Meteor. Soc., 246-250.

A Random Walk Diffusion Model in the Convective Boundary Layer

Li Zongkai

(Department of Atmospheric Sciences, Nanjing University, Nanjing 210008)

Du Shuming

(Nanjing Institute of Meteorology, Nanjing 210044)

Abstract

After analysing the structure of turbulence in convective boundary layer (CBL), it is first suggested that the vertical diffusion in CBL can be simulated by turbulence on two different scales, and then a simple random walk diffusion model for CBL is developed. Two cases of elevated continuous point sources in a typical convective condition are simulated in comparison with the Willis and Deardorff water tank modelling, Lamb's numerical simulation, and CONDORS field experiments. We are confident that the model can successfully simulate the cross-wind integrated concentration distribution in CBL, and that our model has advantages of using less input parameters, much short computation time and is more suitable for practical uses.

Key words: Convective boundary layer; Large eddy; Vertical diffusion.