

对流边界层中地面源的铅直扩散模拟

杜曙明

李宗恺

金龙山

(加拿大埃尔特大学地理系)

(南京大学大气科学系, 南京 210008)

提 要

对流边界层(CBL)中高架源浓度轴线下倾而地面源浓度轴线上升。本文分析了形成这种相反的几何图象的机理, 从而认为: 只要能够恰当模拟 CBL 中铅直湍流结构的特征, 一个粒子随机扩散模式应既能模拟高架源的扩散, 也能模拟地面源的扩散。因此, 用作者原先模拟高架源的模式模拟了地面源的铅直扩散, 同样获得较好的结果, 进一步证实了模式的有效性。本文还应用 Thomson 准则检验了模式, 讨论了它在理论上的合理性和适用范围。

关键词: 对流边界层; 地面源; 铅直扩散。

一、引 言

Willis 和 Deardorff 用水槽模拟 CBL 中的铅直扩散, 发现高架源浓度轴线下倾, 地面源浓度轴线上升^[1,2]; Lamb 数值模拟的结果与水槽试验大同小异^[3,4]。这些结果对大气扩散计算有重要的现实影响: 与传统的高斯模式相比, CBL 中高架源的地面最大浓度更高, 其位置离源更近, 而地面源造成的地面浓度随距离减小更快。因此, CBL 中的扩散问题引起了广泛的重视, 一些研究者从不同的理论途径发展了 CBL 中的扩散模式。一类是解析形式的概率密度函数 (PDF) 模式, 李宗恺等发展的两个模式为代表^[5], 其中, 李宗恺建立的双正态 PDF 模式已为美国 EPA 的 CTDM 研究计划所建立的最新一代复杂地形高架源模式所采用^[6]。另一类则是复杂的数值模式, 例如 Sun 和 Shang 的二阶闭合模式^[7]等。

通过对 CBL 中铅直湍流特征的分析, 作者发展了一个高架源的粒子随机扩散模式, 计算了高度为 CBL 高度 $1/4$ 及 $1/2$ 二种污染源的铅直扩散, 与水槽试验、大涡数值模拟以及 CONDORS 外场试验结果符合甚好^[8]。该模式有输入参数少、计算量极小和简单实用的优点; 同时, 在复杂流场中比 PDF 解析模式有更好的应用前景。

本文分析了 CBL 中铅直扩散的机理, 认为虽然 CBL 中高架源和地面源烟流有截然相反的几何图象, 但它们都是由 CBL 中铅直湍流的特征造成的, 一个合理的模式不仅应能成功地模拟高架源的扩散, 同样应能成功模拟地面源的扩散。为此, 本文用所建立的粒子随机扩散模式^[8]模拟了地面源的铅直扩散, 并与地面源的水槽试验、大涡数值模拟和 CONDORS 试验结果比较, 进一步证实了该模式的合理性。

1993年5月16日收到, 1994年3月12日收到修改稿。

* 本文在自然科学基金 (49130012) 资助下完成。

粒子随机扩散模式不需要通过间接参数化的方法闭合方程, 它的拉格朗日性质更直接地揭示了湍流扩散过程的本质, 同时对非定常、非均匀复杂流场中的扩散有广泛的适用性, 近年来这类模式得到日益广泛的应用。但是如何从理论上考察这类模式, 以便使它们的设计在理论上更合理? 一些研究者提供了这类模式应满足的理论准则, Thomson 系统总结和发展了这方面的研究, 讨论了判别随机扩散模式的五项准则, 并且证明只要满足“充分混合约束”(well-mixed constraint)条件, 就必然满足其他所有准则^[12]。本文用它检验了我们的模式, 结果表明, 在无因次距离 $X \leq 4$ 的实用范围内, 充分混合条件基本满足, 但是为使模式严格满足理论准则, 还需要作进一步改进。

二、CBL 中的铅直扩散机理

在晴朗小风的天气, 同时由高架源和地面源连续释放被动示踪剂, 其烟流图象呈相反的趋势, 前者浓度轴线下倾, 后者上升。这是水槽试验等研究的结论, 也为 CONDORS 外场试验所证实。上述现象在均匀湍流场中无法解释, 也不能用经典的高斯模式来模拟。此时, 似乎湍流对被动粒子有选择性, 分别对高架源和地面源释放的粒子产生了不同的影响。因此, 在建立 CBL 中铅直扩散模式时, 有必要分析其扩散机理, 以便提出比较合理的模拟方案。

CBL 中的扩散本质上取决于它的湍流结构。通过 70 年代以来的许多观测, 对 CBL 中的湍流结构有了比较全面的了解, 与构造铅直扩散模式有密切关系的主要特征可归结为:

1. 存在因热对流形成的大湍涡, 其尺度与 CBL 的高度 Z_i 相当, 由许多上下贯穿的上升暖流和下沉气流构成, 它们有明显的非对称、非均匀性。

2. 由于上升气流的辐合作用, 近地面的空气将被“扫入”上升暖流的底部。随着高度的增加, 上升暖流的升速加快, 截面积迅速减小, 在大约 $0.1-0.8Z_i$ 的范围内, 其截面积明显小于下沉气流, 而速度则明显大于后者。

3. 除上述大涡以外, CBL 中还存在许多尺度比大涡小得多的小尺度湍涡, 它们担负着各种次级混合, 在一定程度上减弱了大涡的非均匀作用。

CBL 中不均匀的大涡结构, 是造成高架源和地面源浓度轴线反向的主要原因。在高架源所在的气层中, 上升暖流的截面积明显小于下沉气流, 它所释放的粒子有较多的机会进入下沉气流, 进入上升暖流的粒子较少。因此, 平均的浓度轴线下倾。相反, 近地面源释放的粒子大部分被辐合气流“扫入”上升暖流, 上升的空气被较清洁的下沉气流代替, 造成近地层浓度较低, 平均浓度轴线上升。在上述过程中, 小湍涡的作用仍是重要的, 它们可以使已进入上升暖流的粒子卷出, 进入下沉气流, 反过来也可发生卷入。小湍涡产生的次级混合缓和了在湍涡造成的非均匀性, 使浓度分布趋于平缓。

以上分析表明, CBL 中的湍流结构是一个有机的整体, 它既能使高架源浓度轴线下倾, 又能使地面源浓度轴线上升, 一个合理的粒子随机扩散模式, 应对两者均能适用。为此, 本文在文献[8]模拟高架源的基础上, 进一步模拟了地面源, 以考察该模式是否有效。

三、模式及模拟结果

本文讨论均匀平坦下垫面上的定常铅直扩散, 以便与水槽试验和数值模拟的结果^[2,4]作比较, 因此本文讨论 CBL 已充分发展并相对稳定阶段的粒子扩散, 此时粒子的平均浓度分布是定常的。

根据对 CBL 中湍流特征的分析, 可将粒子的铅直速度分解为大涡及小涡速度两部分。于是任意一个粒子的轨迹方程为

$$\begin{cases} x(t + \Delta t) = x(t) + u(t)\Delta t, \\ Z(t + \Delta t) = Z(t) + [W_L(t) + W'(t)]\Delta t, \end{cases} \quad (1)$$

式中, $u(t)$ 为粒子在 x 方向的速度, $W_L(t)$ 和 $W'(t)$ 分别为大涡和小涡的铅直速度。(1)式的求解取决于如何确定 $u(t)$, $W_L(t)$ 和 $W'(t)$ 。

严格地说, $u(t)$ 应该是粒子在 t 时刻的顺风向瞬时速度。在此, 按照通常的近似方法, 可用平均风速代替, 且仅为高度的函数:

$$\bar{u}(Z) = \begin{cases} \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \frac{Z}{Z_0} - \psi_m \left(\frac{Z}{L} \right) \right] & (\text{近地层}), \\ U & (\text{近地层以上}), \end{cases} \quad (2)$$

同理, $W_L(t)$ 应该是 t 时刻大涡赋予粒子的瞬时铅直速度。但是, 在 CBL 已充分发展且相对稳定的阶段, 只要采样时间达到数十分钟, 即可得到一个与时间无关的关于 $\bar{W}_L$ 的稳定的分布。又由于下垫面是均匀平坦的, $\bar{W}_L$ 应与水平位置无关。事实上, AMTEX 研究计划的大量观测表明, $\bar{W}_L$ 仅是高度 Z 的函数。因此, 为了模拟粒子平均浓度的定常分布, 同样可以用 $\bar{W}_L$ 近似取代 W_L 。为了方便, 并与文献[8]一致, 下文均用 W_L 表示。

大涡的铅直速度由上升暖流 W_T 和下沉气流 W_D 组成。利用 AMTEX 的观测结果并经过分析、改进以后, 有^[8]

$$W_L = \begin{cases} C_1 W^* \left(\frac{Z}{Z_i} \right)^{1/3} \left(1 - 1.1 \frac{Z}{Z_i} \right) & (\text{上升暖流}), \\ -\frac{2}{3} C_1 W^* \left(\frac{Z}{Z_i} \right)^{1/3} \left(1 - 1.1 \frac{Z}{Z_i} \right) & (\text{下沉气流}), \end{cases} \quad (3)$$

式中, W^* 是对流速度尺度, C_1 为待定的大于 1 的常数。

小涡的速度, 由 Langevin 方程增加湍流切变订正后解得的 Monte-carlo 关系表示^[8]:

$$W'(t + \Delta t) = W'(t)R_L(\Delta t / T_{LZ}) + \sigma_{W'}[1 - R_L^2(\Delta t / T_{LZ})]^{1/2}\zeta, \\ + [1 - R_L(\Delta t / T_{LZ})]\bar{W}(t), \quad (4)$$

$$R_L(\Delta t / T_{LZ}) = \exp(-\Delta t / T_{LZ}), \quad (5)$$

$$\bar{W}(t) = T_{LZ} \frac{\partial \sigma_{W'}^2}{\partial Z}. \quad (6)$$

以上各式中, $R_L(\Delta t / T_{LZ})$ 是 $W'(t)$ 的拉格朗日相关系数, T_{LZ} 是拉格朗日时间尺度, ζ_i 是平均值为零、标准差等于 1 的随机数, $\overline{W}$ 是粒子的飘移速度。 $\sigma_{W'}^2$ 、 $\sigma_{W''}$ 和 T_{LZ} 的求取方法见文献[8]。

利用以上各式可计算出一个粒子的轨迹, 在完成足够多的粒子轨迹计算后, 即可由下式得到无因次横风向积分浓度:

$$C_y = \frac{N_{ij} \Delta t U Z_i}{N \Delta X_i \Delta Z_j}, \quad (7)$$

式中, 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, ΔX 和 ΔZ 分别为数值计算的水平和铅直格距。上下边界仍假设为刚性边界。

为了检验本模式对地面源是否有效, 将模式计算结果与水槽试验和 CONDORS 外场试验, 以及 Lamb 数值模拟结果作了多方面的比较。模式主要计算参数取在上述试验设计的范围内, 结果经无因次化以后进行比较。具体的计算数据为: $W^* = 2 \text{ m/s}$, $U = 5 \text{ m/s}$, 源高 $Z_s = 0.067 Z_i$, $\Delta t = 10 \text{ s}$, $\Delta x = 100 \text{ m}$, $\Delta Z = 25 \text{ m}$, $N = 10^4$ 。

图 1 为本模式与 Deardorff 和 Willis^[2] 水槽试验结果的比较。图中横坐标为无因次距离 ($X = x W^* / Z_i U$), 纵坐标为无因次高度 Z / Z_i , 图中的等值线为无因次横风向积分浓度值:

$$C_y = \frac{U Z_i}{Q} \int c dy. \quad (8)$$

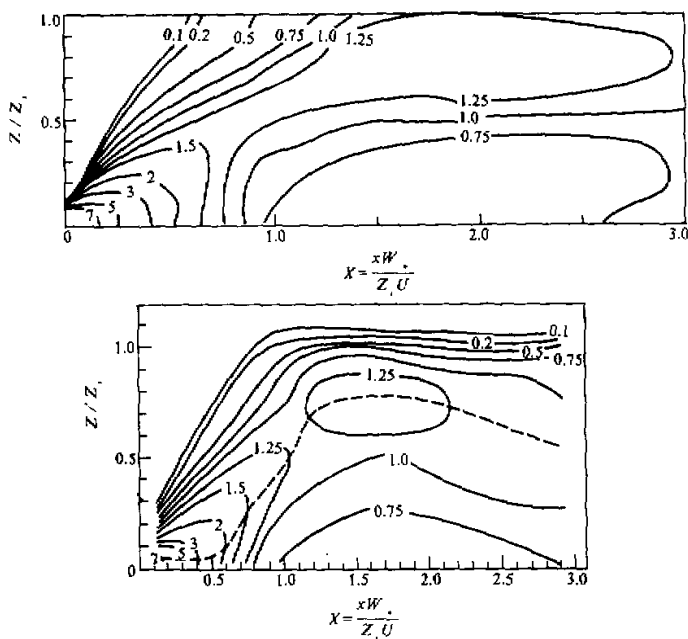


图 1 本模式与水槽试验结果的比较 (上图为本模式计算结果)

从图 1 可见, 本模式模拟的结果与水槽试验结果的基本特征一致, 都发现有地面源浓度轴线明显上升的现象, 地面浓度及其随距离减小的情况也基本相同。两者的主要差别在 CBL 的上部。由于实际的 CBL 的顶部是软边界, 存在着夹卷等多种复杂过程, 本模式为了简化, 假定 CBL 的顶是刚性边界, 必然导致与实况的偏离^[5]。另一方面, 从环境应用的角度来看, 主要关心较低层的浓度场, 因此本模式的上述简化可以满足应用的需要。这种情况与高架源的模拟结果相同^[8]。

CONDORS 研究计划是专门为研究 CBL 中铅直扩散而设计的研究计划, 图 2 是该计划外场试验的一上典型个例^[9]。比较图 1 及图 2, 可见前述基本特征仍是一致的(图 2 中因横坐标与纵坐标的比例不同, 浓度等值线显得比较扁平)。从已获得的全部 CONDORS 资料表明图 2 的结果具有代表性。

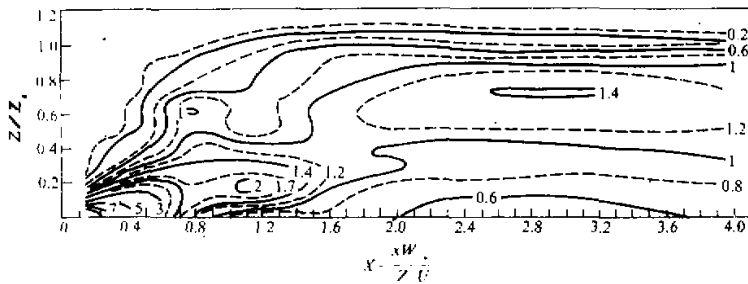


图 2 本模式与 CONDORS 试验典型结果的比较

Nieuwstadt 用对流尺度分析了草原计划外场观测资料, 并与 Deardorff 和 Willis 近地面源 ($Z_s / Z_i = 0.067$) 水槽模拟^[2]以及 Lamb 数值模拟^[4]的结果作了比较^[10] (见图 3)。图中加入了本模式的计算结果, 用倒三角符号表示。可见, 我们的模式虽然十分简单, 但与上述三项试验及模拟结果的一致性很好。

利用 CONDORS 外场试验资料还可以从另一个角度来检验本模式的结果。Briggs 等^[11]用该项试验资料得到无因次铅直扩散参数与无因次距离之间的如下拟合关系:

$$\sigma_z / Z_i = 0.6X / (1 + 5X^2)^{1/2}, \quad (9)$$

式中, σ_z 为铅直扩散参数, X 为无因次距离, 且有

$$X = \frac{xW_i}{UZ_i}, \quad (10)$$

应用本模式预测的横风向积分浓度可以进

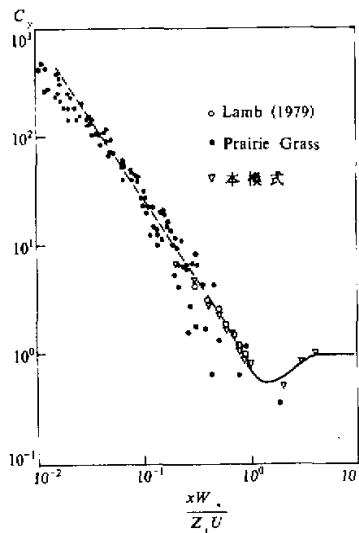


图 3 本模式与 Nieuwstadt 分析结果的比较

一步计算各个距离上的铅直扩散参数:

$$\sigma_z = \left[\frac{\sum_j (Z_j - \bar{Z})^2 C_{yj}}{\sum_j C_{yj}} \right]^{1/2}, \quad (11)$$

$$\bar{Z} = \frac{\sum_j Z_j C_{yj}}{\sum_j C_{yj}}. \quad (12)$$

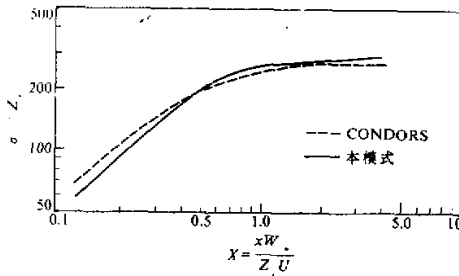


图4 本模式的 σ_z / Z_i 值
与CONDORS试验比较

值为0.288, 与理论值已十分接近。CONDORS试验的相应值为0.27, Briggs等^[11]认为这是由于对远距离近地面扩散物质浓度的遥感测量值偏低造成的。

综合以上的分析与比较, 可以认为本文所采用的模式对CBL中地面源的铅直扩散同样适用。正如前文所指出的, CBL中的铅直湍流场是一个整体, 一个合理的模式应能同时有效地模拟高架源和地面源的扩散, 本文的结果进一步证实作者所发展的模式基本上是合理的。

四、粒子随机扩散模式的理论检验

大气湍流的复杂性质, 使得至今没有任何一类大气扩散模式在理论上是完美的。例如, 只有当湍流速度可视作均质及平稳随机过程时, 方能证明扩散粒子的分布符合正态律, 并且可由Taylor公式从理论上计算粒子位移的方差, 此时高斯扩散模式在理论上方才完美; 大气扩散K理论模仿分子扩散闭合平流扩散方程, 但无法像分子过程那样严格建立属性通量和局地平均梯度之间的关系式, 这一理论缺陷大大限制了它的适用范围; 高阶闭合模式明显减少了一阶闭合的经验成分, 但最终仍不可能确立任何理论的闭合关系。

显然, 每一个大气扩散模式的适用范围和精度与它们在何种条件下严格成立, 或者说与它们的理论局限性有密切关系, 为此需要建立相应的理论准则来加以判别。例如对K模式, 要求其满足一定的尺度条件: 浓度场平均梯度发生明显变化的时间和空间尺度应充分大于湍流的时、空尺度; 至于高斯扩散模式, 则必须在均匀、定常的湍流场中才严格成立。

粒子随机扩散模式从原理上并不要求均匀定常等严格的流场条件, 但是, 这种理论途径的基本点, 是可以将湍流场看作一定外部条件所决定的无数相似流场构成的统计集

经无因次化以后可以与(9)式进行比较, 图4是两者的比较结果。可见本模式的 σ_z / Z_i 值与CONDORS试验吻合程度尚好, 在近距离模式计算值略低, 远距离则略高。外场试验的情况比较复杂, 目前我们还无法解释近距离略偏低的原因。在远距离, 当扩散物质没有损耗, 并在铅直方向达到均匀分布时, σ_z / Z_i 应趋近于它的理论值0.289。本模式未考虑扩散粒子的损失, 在无因次距离 $X=4$ 处 σ_z / Z_i 的

综。因此, 在构造这类模式时仍要求满足一定的理论条件。Thomson^[12]总结了前人的研究, 系统讨论了在非均匀、非定常湍流中粒子随机扩散模式应满足的五项准则和它们之间的关系, 并且证明只要满足“充分混合约束”准则, 其他准则将自动满足。

为了检验本模式在理论上是否完美, 我们根据 Thomson 给出的充分混合准则设计了数值试验。结果表明在粒子运行时间(或距离)不太大的时候 ($X \leq 4$) 充分混合准则基本满足, 但若进一步加大计算范围, 将逐渐出现明显的非均匀偏离, 说明本文模式不能严格满足所规定的理论准则。为此, 我们进一步分析了它的原因和模式的合理性及其适用范围。

本模式中 W_L 和 W' 具有可加性, 故可分别加以讨论。由于(4)式考虑了 $\partial \sigma_w^2 / \partial z \neq 0$ 的影响, 已排除可能由 $W'(t)$ 产生的粒子积累, 故 $W'(t)$ 应无问题。当模式计算的时间、空间步长 dt 、 dz 取数学上的无限小量时, (3)式给定的 W_L 能够满足单位时间穿过水平小面元 ds 向上和向下的粒子数相等, 但若取有限的 Δt 和 ΔZ , 则不满足

$$\rho(Z + \Delta Z)W_D(Z + \Delta Z) = \rho(Z - \Delta Z)W_T(Z - \Delta Z), \quad (13)$$

式中, ρ 为粒子数密度, W_D 和 W_T 为下沉气流和上升暖流的速度, 且有

$$PW_T(Z) = (1 - P)W_D(Z). \quad (14)$$

P 为上升暖流所占的面积权重^[6]。

进一步的数值试验表明, 减小模式所取的时间和空间步长可以增加近似满足充分混合条件的范围。

五、结 论

CBL 中的铅直湍流具有明显的非均匀、非对称和非高斯分布性质, 致使其中的高架源浓度轴线下倾而地面源浓度轴线上升, 形成相反的几何图象。本文阐明了这种现象的机理, 从而指出既然这种现象可同时发生在同一个湍流场中, 那么一个能够恰当模拟 CBL 中铅直湍流结构特征的扩散模式, 应既能模拟高架源, 也能模拟地面源。

应用作者早先用来模拟高架源的粒子随机扩散模式模拟了地面源的铅直扩散。通过多种方式的比较, 表明在 CBL 下部, 模式计算结果与水槽模拟、CONDORS 外场试验以及 Lamb 大涡数值模拟结果的一致性均较好, 从而证实了本文对 CBL 中铅直扩散机理的分析, 也进一步证实了所发展模式的合理性。模式将 CBL 顶部作为刚性近界简化处理, 使 CBL 上部的模拟结果出现明显偏差, 但从环境应用的需要来看, 主要关心近地面和低层的浓度分布, 上述偏差不会影响模式的应用效果。

本文模式不能严格满足非均匀、非定常湍流场中关于粒子随机扩散模式的理论准则, 但通过数值试验表明, 按模式中所取的时间和空间步长, 则在 $X \leq 4$ 的范围内“充分混合”准则仍能近似满足。

进一步的研究, 是要在保持简单实用这一优点的前提下, 改善对 CBL 上部浓度分布的模拟, 并使模式的构造在理论上更合理。

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] Deardorff J.W. and Willis G.E., 1975, A parameterization of diffusion into the mixed layer, *J. Appl. Meteor.*, **14**, 1451-1458.
- [3] 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.), 159-229, D.Reidel, Boston.
- [4] Lamb R.G., 1979, The effects of release height on material dispersion in the convective planetary boundary layer, *Preprints Fourth Symp. on Turbulence, Diffusion and Air pollution*, Reno, Amer. Met. Soc., 27-33.
- [5] Li Zongkai and Briggs G.A., 1987, Simple PDF models for convective driven vertical diffusion, *Atmospheric Environment*, **22**, 55-74.
- [6] Perry S.G., 1992, CTDMPLUS: A dispersion model for sources near complex topography, Part I: Technical formulations, *Journal of Applied Meteorology*, **31**, 633-645.
- [7] 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.
- [8] 李宗恺, 杜曜明, 1993, 一个对流边界层中的随机扩散模式, *大气科学*, **17**, 1-9.
- [9] Briggs G.A., 1989, Field measurements of vertical diffusion in convective conditions, *Preprints, 6th Joint Conference on Application of Air Pollution*, Anaheim, Amer. Meteor. Soc., 167-170.
- [10] Nieuwstadt F.T.M., 1980, Application of mixed-layer similarity to the observed dispersion from a ground level source, *J. Appl. Meteor.*, **19**, 157-162.
- [11] Briggs G.A., Eberhard W.L., Gaynor J.E., Moninger W.R. and Uttal T., 1986, Convective diffusion field measurements compared with laboratory and numerical experiment, *Preprints, 5th Joint Conference on Application of Air Pollution Meteorology*, Chapel Hill, Amer. Meteor. Soc., 340-343.
- [12] Thomson D.J., 1987, Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows, *J. Fluid Mech.*, **180**, 529-556.

The Simulation of Vertical Diffusion for the Surface Release in the Convective Boundary Layer

Du Shuming

(Department of Geography, University of Alberta, Canada)

Li Zongkai and Jin Longshan

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

Abstract

It was found that the mode of maximum concentration descended for the elevated releases, but lifted for the near-surface releases in the convective boundary layer (CBL). The mechanism which causes this opposite geometric figures is analysed. It is believed that either the diffusion of elevated releases or that of near surface releases can be simulated by a same random diffusion model, provided the characteristics of the vertical turbulence in the CBL can be simulated properly. Therefore, the model used to simulate the diffusion of elevated releases by authors before is used to the simulation of near-surface releases, and the satisfactory result is obtained as well. This confirms the effectiveness of the model further. The model is examined by the Thomson's criteria. The theoretical reasonableness and the application limits of the model is discussed.

Key words: convective boundary layer; near-surface release; vertical diffusion.