

三维大气扩散粒子分裂(ADPS)模式

周伯生

李宗恺

(能源部苏州热工研究所, 苏州 215004) (南京大学大气科学系, 南京 210008)

提 要

本文描述了基于PIC方法的三维大气扩散粒子分裂(ADPS)模式,并用解析解和1988年的广州地区现场观测资料验证了本模式。模式根据局地均匀和定常假设引入大粒子概念、烟团扩散原理和大粒子分裂技术,并运用了嵌套网格。ADPS模式用于模拟气态污染物在大气中的散布,同时也具备模拟TSP扩散的效能。

关键词: 大气扩散; 空气污染; 大气扩散粒子分裂模式。

一、引 言

根据“七五”攻关课题“广州市大气环境容量及空气污染防治规划研究”的要求,需要建立一个能够模拟广州地区复杂下垫面和复杂气象条件下的三维大气扩散模式。模拟范围是 $52\text{ km} \times 56\text{ km}$,含广州、南海、佛山和花县等城镇。对于大气扩散问题来说,该范围处于中小尺度之间,其中要求重点模拟的广州市城区仅约 360 km^2 ,属典型的小尺度问题。对于上述模拟区域,难以在尺度分析的基础上简化方程,需考虑完全的平流扩散方程。

模拟区域中有约六分之一的复杂下垫面,需要考虑城市热岛和地形影响的作用,区域所处纬度较低,静风和微风频率较高,同时尚需考虑受海陆风影响的可能性,这些都使模式处理变得较为复杂。

根据模拟区域特点以及“精密级”模式的要求,所建模式应具如下效能:能模拟非定常的三维大气扩散过程;能模拟污染物的化学转化和沉积等清除过程对浓度分布的影响;为了应用的需要,模式应具较高的计算效率。

在多方面的考虑之后,我们在粒子—网格元(PIC)模式的基础上建立了一个新的ADPS模式。ADPS模式是在尽量保持PIC模式原有优点的基础上,用新的处理标记粒子的方法来减小计算量,提高模式性能。在许多国家核设施的事故应急实时剂量评价系统中,都把PIC模式作为大气扩散估算的核心模式。

二、ADPS 模式原理

ADPS模式是在湍流扩散梯度输送理论与统计理论相结合的基础上建立起来的一种

1990年7月31日收到,1991年2月11日收到修改稿。

动力—统计结合型大气扩散模式.

ADPS 模式的基本原理与 Lange (1978)^[1] 的粒子—网格元模式一致. 本模式的支配方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u_p C) + \frac{\partial}{\partial y} (v_p C) + \frac{\partial}{\partial Z} (w_p C) = Q + R + D, \quad (1)$$

式中

$$\begin{cases} u_p = u + u_D, \\ v_p = v + v_D, \\ w_p = w + w_D. \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} u_D = -\frac{K_x}{C} \frac{\partial C}{\partial x}, \\ v_D = -\frac{K_y}{C} \frac{\partial C}{\partial y}, \\ w_D = -\frac{K_z}{C} \frac{\partial C}{\partial Z}. \end{cases} \quad (3)$$

方程中的符号与习惯用法一致. (1)式右端的 Q, R, D 分别表示污染源源强、化学转化速率和干沉积速率, 而下标 p 和 D 则分别表示伪速度和扩散速度, C 是污染物浓度. 方程 (1) 还隐含了一个基本假定, 即风场 $\vec{v}$ 是无辐散的. 伪速度 $\vec{V}_p$ 和扩散速度 $\vec{V}_D$ 的引入避免了差分方法中常出现的数值伪扩散误差^[1].

PIC 模式在应用过程中首先是计算量大, 如将 PIC 模式直接应用于广州地区, 则其计算量之大难以应用; 其次是 PIC 模式的计算浓度值对释放的粒子数目和取样单元的体积变化较敏感. 例如, 如果取样单元的体积太小, 则浓度分布将变得起伏太大; 相反, 如果取样单元的体积太大, 则浓度分布会被平滑得太厉害. 理论上, 取样单元大小引起的问题可由释放无限多的粒子来解决, 但实际中这又是不可能的.

ADPS 模式应用大粒子概念和烟团扩散原理成功地解决了上述二问题, 其中对后一问题的分析和试验可见文献 [2] 的类似工作.

模式所称的大粒子是指这样一些标记粒子: 粒子本身代表了较大的污染物质量, 一般相当于 PIC 的 $10^2 \sim 10^3$ 倍, 在计算浓度时, 粒子所含物质以一定形式分布在粒子周围的空中, 粒子的运动由粒子所在位置的风速和扩散速度决定.

模式进一步应用烟团扩散原理, 把每个大粒子看作一个“烟团”, 即污染物质量在粒子周围的分布形式取烟团扩散形式. 这样做是因为有关烟团模式的工作已较为成熟, 同时这样也利于模式处理.

如前所述, 正是为了模拟三维非定常扩散才有采用复杂数值模式的必要. 粒子以伪速度运动, 仍保持了复杂 K 模式的效能, 但正态分布的烟团扩散只能在满足局地均匀和定常的有限区段内成立, 经过较长的时间和距离后, 烟团扩散带来的误差将不断增大, 为减小这种误差, 模式引进了大粒子分裂技术.

设满足局地均匀和定常的时段为 ΔT , ΔT 可由数值试验确定, 每一个 ΔT 后大粒子即分裂一次. 考虑到一般情况下, 除了地形起伏较大的区域, 小范围(烟团尺度)内

的风速切变主要在铅直方向, 本模式只处理风速铅直切变对单个烟团的影响, 而风速水平切变的影响是通过风速对区域中不同烟团的作用体现出来的。

三、模式结构及技术处理

1. 网格结构

模式采用笛卡尔坐标系统, 将模拟空间划分成长方体单元, 水平网格与面源划分一致, 采用嵌套网格结构, 广州市城区网格取 $1\text{km} \times 1\text{km}$, 其它地方取 $2\text{km} \times 2\text{km}$. 为计算方便和提高精度, 模式变量定义方法采用: 浓度定义在单元中心, 实际风场及扩散系数定义在单元角点上, 扩散速度和伪速度定义在单元的面元中心。

2. 污染源处理

模式将广州地区污染源归成点源和面源两类, 流动源排放并入相应的面源. 对于面源, 用后退点源法将之简化成一个虚点源, 虚点源的位置根据与面源面积相等的等效源和扩散参数确定. 所有点源每个时步释放一个粒子, 故每个粒子的初始质量为

$$m_i = Q_i \cdot \Delta t, \quad (4)$$

式中, Q_i 为源强, Δt 为时间步长。

3. 烟团扩散计算

本模式用烟团扩散原理计算粒子对网格浓度的贡献. 设粒子位置 (烟团中心) 为 (x_0, y_0, z_0) , 鉴于高斯烟团的分布是无限大的, 首先需要确定实际的计算范围. 本模式确定的计算范围为 $(x_0 \pm 3\sigma_x, y_0 \pm 3\sigma_y, z_0 \pm 3\sigma_z)$, 在此范围内烟团的质量已占全部质量的 99.74%. 设第 j 个单元中分配到的粒子质量 m_j 按下式计算

$$m_j = m_0 \left(P_j / \sum_{k=1}^n p_k \right). \quad (5)$$

m_0 是粒子总质量, P_j 是相应单元所得分配权重,

$$P_j = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{(x_j - x_0)^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y_j - y_0)^2}{\sigma_y^2} + \frac{(z_j - z_0)^2}{\sigma_z^2} \right] \right\}. \quad (6)$$

ADPS 模式因削减粒子数而大幅度减小了计算量, 但是用烟团扩散原理计算浓度分布却比单纯统计网格中粒子数来得复杂, 处理不好会增加额外的计算时间, 本项计算是关键之一。

4. 扩散速度计算

用有限差分方法计算式 (3) 的扩散速度 $\vec{V}_D$. 不失一般性, 考虑 x 方向情形^[1]

$$u_{D,i+\frac{1}{2}} = -\frac{K_{x,i+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{(C_{i+1} + C_{i-1})/2}. \quad (7)$$

同样的方法可计算 y, z 方向的扩散速度。

5. 粒子分裂计算

模式假定大粒子在 z 方向分裂, 为分布对称, 选择次大粒子数目 N 为奇数, 其质量为

$$m_i = m_0 \left(e_i / \sum_{j=1}^N e_j \right), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (8)$$

$$e_j = \exp(-z_j^2 / (2\sigma_z^2)), \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (9)$$

式中 m_i 为第 i 个次级粒子质量, σ_z 为烟团 z 方向的扩散参数, z_j 为第 j 个次级粒子相对于原粒子位置的 z 方向位移.

$$z_j = ((N+1)/2 - j) \sigma_z, \quad j = 1, 2, \dots, N.$$

6. 其它参数影响的考虑

首先是稳定度跃变产生的问题. 本模式所用稳定度是逐时的, 而大气扩散参数又是按稳定度分类计算的, 因此在稳定度跃变时, 扩散参数也将产生跃变而不连续, 这与实际不符. 本模式用有效行程法来处理这种情况, 扩散参数形式为

$$\sigma_i = a_i x^{b_i}, \quad i = x, y, z.$$

a_i 和 b_i 是稳定度的函数, 其中 x 取有效行程, 在每次稳定度发生跃变时, 有效行程作如下订正.

$$x_2 = (a_1 x_1^{b_1} / a_2)^{1/b_2}. \quad (10)$$

下标 1 和 2 分别表示跃变前后的值, 每个时步后有效行程增加粒子在该时步中移动的距离, 这样求出的扩散参数就连续了.

其次是混合层顶的效应. 模式考虑了混合层顶的反射作用及其对抬升烟流的部分穿透效应. 模式假定粒子位于混合层顶以下时, 它对混合层顶以上各单元的浓度没有贡献, 粒子的总质量按高斯分布的权重被分配到混合层顶以下的各单元中; 但位于混合层顶以上的粒子在混合层顶不发生向上的反射. 抬升烟流在混合层顶的穿透效应用 PPSP 方案来处理, 一旦发生部分穿透即产生两个粒子, 质量为

$$\begin{cases} m_{\text{上}} = m_0 p, \\ m_{\text{下}} = m_0 (1-p). \end{cases} \quad (11)$$

m_0 为 Δt 内烟团排出的污染物质量, p 为穿透系数. 两个粒子坐标分别为

$$\begin{cases} Z_{\text{上}} = L + \frac{1}{2} p \Delta H, \\ Z_{\text{下}} = L - \frac{1}{2} (1-p) \Delta H. \end{cases} \quad (12)$$

其中 L 是混合层厚度, ΔH 是 PPSP 方案中烟流抬升高度的修正值.

再次是化学转化与干沉积的影响. 化学转化与干沉积机制都很复杂, 模式作为一级近似将化学转化速率 R 及干沉积速率 D 均取作常数. 化学转化在整个模拟空间起作用, 而干沉积只引起低层浓度的改变. 烟团在地面产生反射.

四、误差分析

本模式的某些处理方法如有效行程法、污染物反射以及化学转化和干沉积的处理方案等已普遍采用, 其误差范围在扩散计算中是可以接受的, 同时模式不存在欧拉型模式的数值伪扩散, 所以需要进一步分析的误差来源是扩散速度的差分方案可能引起的误差.

以 x 方向为例, 将 C_i 和 C_{i+1} 在 $C_{i+\frac{1}{2}}$ 处展开并相减, 略去高阶项, 得

$$\frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta x} = \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \right)_{i+\frac{1}{2}} \Delta x^2, \quad (13)$$

结合 (3) 式和 (8) 式, 得

$$u_{Di+\frac{1}{2}} = u_{DAi+\frac{1}{2}} + R_{uD}. \quad (14)$$

式中 $u_{Di+\frac{1}{2}}$ 为用差分方案计算的扩散速度, $u_{DAi+\frac{1}{2}}$ 是实际的扩散速度.

$$u_{DAi+\frac{1}{2}} = - \frac{K_{xi+\frac{1}{2}}}{C_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}}. \quad (15)$$

R_{uD} 为误差项.

$$R_{uD} = - \frac{K_{xi+\frac{1}{2}}}{24 C_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \right)_{i+\frac{1}{2}} \Delta x^2. \quad (16)$$

上式表明, 扩散速度的误差项与扩散系数及网格间距的平方成正比, 并依赖于对浓度的三阶导数.

大多数情况下, 浓度的空间变化比较平缓, 特别是在数值模式中, 浓度的局地起伏已在计算网格系统中作了某种程度的平滑化, 可表示为距离的一次或二次多项式函数, 则其距离的三阶导数为零, 故 $R_{uD}=0$, 至少 $R_{uD} \approx 0$.

我们还计算了当浓度呈正态分布或与距离的某次方成反比的情形, 均可证明, 只要选取适当的参数, 可将扩散速度计算到所要求的精度.

五、模式验证

本模式用解析解和现场资料作了验证. 解析验证包括无风瞬时点源和面源等, 解析结果和模式预测结果吻合很好, 本部分主要分析实测验证情况.

1988年1月5日至20日及6月25日至7月15日在珠江三角洲地区进行了大规模的气象及污染物浓度的同步观测试验. 气象部分包括多测站的风温廓线观测.

1. 模式的输入、输出参数

模式的输入参数主要为污染源资料和气象资料, 分别见表1和表2.

表 1 污染源资料概况

污染物	污染源类型		数 目	资 料 情 况
SO ₂	点 源		39	坐标、源强、源高、烟囱内径、出口烟速及烟温、气温
	* 面源	1 × 1km	360	坐标(包括地形高度),按小于20 m 及 20 ~ 30、30 ~ 40m 输入源强
		2 × 2km	638	
NO _x	同 SO ₂		同SO ₂	汽车排放归并入小于20 m 的面源,其它同 SO ₂

* 有些面源方块的源强为零.

表 2 气象资料情况

项 目	资 料 情 况
大气稳定度	根据实测资料按小时划分稳定度
扩散参数	根据实测资料按稳定度类别给定
混合层高度	根据实测资料按小时内插给定
风 场 *	根据多测站资料内插,并按网格输入
扩散系数	根据边界层模式给出的 K 值按网格输入

* 内插出的风场根据 sherman (1978) ^[3] 的方法,作三维无辐散调整,根据假定,模式输入的风场应该是三维无辐散的.

模式输出是按网格给出的小时平均浓度和日平均浓度.

2. 与测量结果的比较

表(3)列出了 SO₂ 及 NO_x 计算值与观测值的比值 K 的变化范围和平均值 $\overline{K}$.

表 3 计算值与观测值的比较

污染物	K 值范围	$\overline{K}$	误差2倍以内样本 (%)	误差 3 倍以内样本 (%)
SO ₂	0.27 — 6.88	1.39	48	81
NO _x	0.38 — 4.08	1.32	68	84

表 3 结果为一般水平,原因是多方面的.主要原因是模拟区域范围较大,污染源复杂,无法较精确统计,浓度分布除广州城区至黄埔一线外,大部分地区的值很小 ($< 0.05 \text{ mg/m}^3$),此时尽管绝对误差不大,但相对误差仍可较大,若不计浓度小于 0.03 mg/m^3 的点,则结果有较大改善,见表 4.

表 4 计算值与观测值的比较(不计极低浓度)

污染物	K 值范围	$\overline{K}$	误差2倍以内样本 (%)	误差 3 倍以内样本 (%)
SO ₂	0.27 — 5.32	1.33	65	89
NO _x	0.38 — 3.84	1.28	76	92

我们根据观测值和计算值绘制了大量浓度等值线图以比较两者浓度分布的情况,比较结果表明图形及高浓度中心基本吻合,但在数值上计算值略高.图 1 至图 4 是 1988 年

7月5日的一次实例比较.

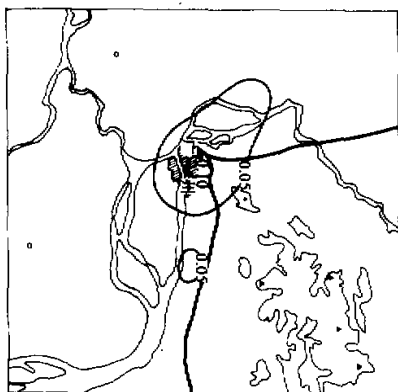


图1 1988年7月5日SO₂观测浓度等值线

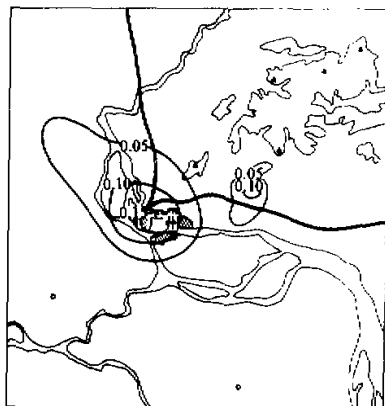


图2 1988年7月5日SO₂计算浓度等值线

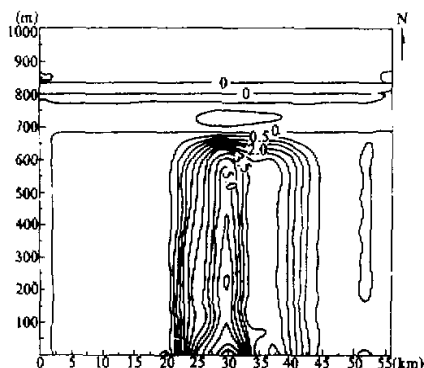


图3 1988年7月5日10:00 SO₂计算浓度铅直断面等值线

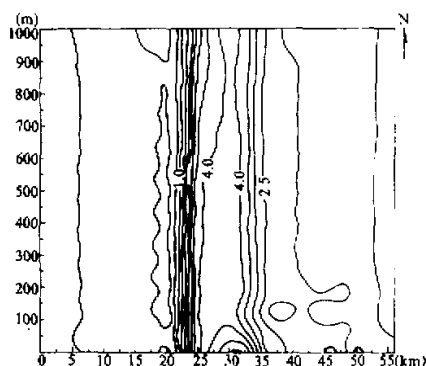


图4 1988年7月5日14:00 SO₂计算浓度铅直断面等值线

图1是实测的SO₂日均浓度分布图,图2则是对应的计算结果,两者形状很相似.图3和图4是计算值的铅直断面浓度分布图,图3是10点钟的情形,可看出混合层已发展至700 m左右,地面高浓度区位于广州市区,污染物基本上被限制在混合层内.图4是14点钟的情形,此时对流充分发展,混合层突破1000 m,除地面仍有局部的高浓度中心外,整个混合层内的浓度几乎是均匀的.

比较结果指出,ADPS模式能较实际地模拟污染状况,计算值略偏高与污染源的不确定性有很大关系,特别在夜间,许多实际的污染源已停止排放,但用于模式计算的源强却没有随之变化.另外,区域内设置的浓度监测点有限,某些高浓度点没有监测到,这造成了计算和实测的浓度分布之间的不完全一致.

六、结 语

ADPS 模式应用湍流扩散统计理论的局地均匀和定常原理对 PIC 模式作了很大改进。大粒子概念和烟团扩散原理的引入使模式计算效率大大提高,同时改善了浓度分布对取样单元体积的依赖性,用较少的粒子数目就能产生较光滑的浓度分布。大粒子分裂技术保持了模式处理复杂流场的能力。模式采用了嵌套网格对广州市城区使用细网格进行重点模拟,进一步改善了模式的性能。本模式用解析解和 1988 年的广州地区现场测试资料作了验证,并和高斯型模式作了比较,结果表明 ADPS 模式具有模拟大气扩散过程和实际空气污染的效能。

目前的 ADPS 模式尚属初型,有些方面有待于进一步的研究,如各种条件下局地均匀和定常时段的详细分析,水平方向风切变对单个烟团扩散的影响,模式中用到的各参数的详细灵敏度分析,等等。

致谢: 本文所用的资料来自广州课题组,谨向参加此课题的有关单位和同志表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] Lange, R., 1978, ADPIC-A Three-Dimensional Particle-In-Cell Model for the Dispersal of Atmospheric Pollutants and Its Comparison to Regional Tracer Studies, *J. Appl. Meteor.*, 17, 320—329.
- [2] Yamada, T. and S. Bunker, 1988, Development of a Nested Grid, Second Moment Turbulence Closure Model and Application to the 1982 ASCOT Brush Creek Data Simulation, *J. Appl. Meteor.*, 27, 562—578.
- [3] Sherman, C.A., 1977, A Mass-Consistent Model for Wind Fields over Complex Terrain, *J. Appl. Meteor.*, 17, 312—319.

A Three Dimensional Particle-Splitting Model for Atmospheric Dispersion

Zhou Bosheng

Li Zongkai

(Suzhou Thermal Engineering Research Institute, Ministry
of Energy Resources, Suzhou 215004)

(Nanjing University, Nanjing 210008)

Abstract

A Three-Dimensional Particle-Splitting Model for Atmospheric Dispersion (ADPS Model) which is based on the PIC method is described and tested with the analytical solutions and the data obtained in Guangzhou region in 1988. The model introduces the nested grid capability and big particle definition, puff diffusion theorem and particle-Splitting technique under the assumption of the local time-independent and local spatial uniform. The model is used to simulate atmospheric dispersion of gaseous pollutant and also has the ability to simulate the TSP dispersion.

Key words: Atmospheric dispersion; Air Pollution; PIC (Particle-In-Cell) model; ADPS (Atmospheric Dispersion Particle-Splitting) model.