

一个预测沿岸陆上熏烟扩散的 随机游动模式

于洪彬 蒋维楣

(南京大学大气科学系, 南京 210008)

提 要

本文建立了一个对流边界层中的随机游动扩散模式, 并用 KNRC 试验 No. 64 的资料作了验证. 然后考虑混合层顶不规则夹卷界面的作用, 应用于楠蒂科克沿岸陆上熏烟扩散问题, 将模拟的地面轴线浓度与观测资料以及三个熏烟扩散预测模式的结果作了比较. 结果表明: 模式的模拟效能良好. 所有数值计算均可在微机上实现, 便于推广应用, 更具实用性.

关键词: 随机游动扩散模拟; 对流边界层; 内边界层; 熏烟扩散; 夹卷.

一、引 言

当气流由一种性质的下垫面运行至另一种特性的下垫面时, 由于下垫面的热力和动力性质的差异, 会形成热力和动力内边界层. 内边界层内外的湍流特性有着明显的差异, 从而直接影响污染物的输送与扩散, 一种重要的现象就是熏烟扩散. 显然, 以惯用的高斯模式或 K 模式描述熏烟扩散是不合适的; 高阶闭合模式亦有其理论和应用上的缺陷. 许多学者曾对熏烟扩散现象作过研究, 提出不少经验性的熏烟扩散模式, 基本上都是在高斯模型上的修正. 但即使在美国《空气质量模式导则》的最新版本中, 也未能推荐一种实用的熏烟扩散预测模式. 随机游动模式是拉格朗日型的, 从而可以更直接地揭示湍流扩散过程的本质现象; 它具有广泛的适用范围, 能够处理非均匀、非定常、非高斯型湍流场中的扩散问题; 而且还可以避免数值计算不稳定、负值浓度等问题, 计算量适中. 因此, 随机游动模式用来模拟熏烟扩散特征是可取的.

为此, 我们建立了一个对流边界层中扩散的随机游动模式, 并用 KNRC (Karlsruhe Nuclear Research Center) 的试验^[1] No. 64 资料作了模式验证. 然后考虑混合层顶不规则夹卷界面的作用, 应用于处理楠蒂科克沿岸熏烟扩散问题, 将模拟的地面轴线浓度与试验观测值及其它熏烟扩散预测模式的结果作了比较, 效果是令人满意的.

二、对流边界层中的随机游动扩散模式

随机游动模拟(又称蒙特卡罗模拟)通过大量粒子的释放来实现. 粒子在流场中按平均风输送, 同时又用一系列随机位移模拟湍流扩散, 其轨迹方程如下:

1992年3月1日收到, 5月15日收到修改稿.

$$\begin{aligned} X_{i+1} &= X_i + (U + u') \Delta t, \\ Y_{i+1} &= Y_i + (V + v') \Delta t, \\ Z_{i+1} &= Z_i + (W + w') \Delta t, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 U, V, W 为平均速度, u', v', w' 为随机脉动速度, 可由马尔可夫链的处理方法得到

$$\begin{aligned} u'_{i+1} &= u'_i R_u + (1 - R_u^2)^{1/2} \sigma_u \eta, \\ v'_{i+1} &= v'_i R_v + (1 - R_v^2)^{1/2} \sigma_v \eta, \\ w'_{i+1} &= w'_i R_w + (1 - R_w^2)^{1/2} \sigma_w \gamma + (1 - R_w) T_w \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z}. \end{aligned} \quad (2)$$

这里考虑了 σ_w^2 的垂直不均匀性, 加上一个飘移速度项; η, γ 是平均值为零、标准差等于 1 的高斯型随机数, 由计算程序自动产生; $\sigma_u, \sigma_v, \sigma_w$ 为湍流脉动速度标准差; R_u, R_v, R_w 为自相关系数, 取通用的指数形式, 即

$$R_i = \exp(-\Delta t / T_{ii}) \quad (i = u, v, w). \quad (3)$$

T_{ii} 为拉格朗日时间尺度, 这里取 Hanna^[2] 的拟合公式:

$$T_{iu} = T_{iv} = \frac{0.15 Z_i}{\sigma_u}, \quad (4)$$

$$T_{iw} = \begin{cases} \frac{0.1Z}{\sigma_w \left[0.55 + 0.38 \frac{Z - Z_0}{L} \right]} & \left(\frac{Z}{Z_i} < 0.1, -\frac{(Z - Z_0)}{L} < 1 \right), \\ \frac{0.59}{\sigma_w} & \left(\frac{Z}{Z_i} < 0.1, -\frac{(Z - Z_0)}{L} > 1 \right), \\ \frac{0.15Z_i \left[1 - \exp\left(-\frac{5Z}{Z_i}\right) \right]}{\sigma_w} & \left(\frac{Z}{Z_i} > 0.1 \right), \end{cases} \quad (5)$$

其中 Z_i 为对流边界层顶高度, Z_0 为粗糙度长, L 为 M-O 长度.

KNRC 试验^[1, 3] No. 64 的条件为: $Z_0 = 1.5\text{m}$, $Z_i = 1500\text{m}$, 源高 $h = 160\text{m}$, 施放示踪物 CF_2Br_2 的源强 $Q = 26.7\text{g/s}$. 由 200m 铁塔上 5 个高度 (40, 60, 100, 160, 200 m) 逐时观测的风速风向, 用指数律拟合 300m 以下 (近地层) 的 U, V , 300 米以上的风不变. 由 40, 100, 160 m 3 个高度逐时观测的水平风向脉动 σ_θ 和垂直风向脉动 σ_ϕ 得到 σ_u 和 σ_w , 160 m 以下层间由该数据内插获得, 该高度以上则为线性减小, 令边界层顶的 $\sigma_u = 0$, $\sigma_w = 0.37W$; 同时令 $\sigma_v = \sigma_u$. 由 1.5m 高处观测的净辐射值 R_n 计算对流速度尺度 W 和 L , 显热通量 Q_0 与 R_n 具有如下简单的关系^[4]:

$$Q_0 = 0.47 R_n. \quad (6)$$

从而可根据 W 及 L 的定义来计算.

试验中, 共施放 $N = 3600$ 个粒子. 鉴于对流边界层的气流的特殊结构, 模拟中 60% 的粒子向下运动 ($W = -0.4W$), 40% 的粒子向上运动 ($W = 0.6W$), 即每释

放 5 个粒子，第 1，3，5 个粒子向下运动，第 2，4 个粒子向上运动。当粒子到达边界层顶和底（取一参考高度 $Z_0/4$ ）时，它们立即由上升气流的 w 变为下沉气流的 w （或相反）。网格距取为 $\Delta x = \Delta y = 200\text{ m}$ ， $\Delta Z = 30\text{ m}$ 。时间步长的选取一般应满足 $\Delta t < T_i$ ，这里取 $\Delta t = 0.1T_{iw}$ 。由于 T_{iw} 随高度增加而增加，这种变时步取法可以比取常值时间步长更加细致地描述近地面的粒子扩散行为，而且实践也表明这样处理可节省计算时间。统计各个网格元中的粒子数即可计算污染物的浓度

$$C_i(x, y, z) = \frac{Q \sum_j T_{ij}}{N \Delta x \Delta y \Delta z}, \tag{7}$$

其中 T_{ij} 为第 j 个粒子在 i 网格的逗留时间，这样算出的即为网格 i 上的污染物浓度。网格 i 是 $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ 的体元，具有三维性。给定座标 X, Y, Z ，即可确定其网格号。

表 1 KNRC 试验各测点的观测浓度和模式计算浓度

下风距离 (m)	方位角 (度) (由北顺时针旋转)	计算浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	观测浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
285	242	74.85	29.00
315	263	93.72	50.69
200	271	106.11	125.87
280	292	63.71	117.79
290	306	25.69	21.92
320	329	5.45	8.39
700	227	0.54	0.13
585	231	5.18	2.00
580	239	9.62	7.07
595	247	16.92	37.86
600	255	26.42	29.79
615	263	33.71	52.14
635	270	26.97	36.49
625	281	29.31	51.58
630	291	40.32	39.54
605	300	19.54	25.06
600	313	1.45	0.62
1240	246	0.00	0.92
1110	263	5.11	6.05
1090	278	9.97	6.72
1130	289	6.64	18.29
1140	308	0.25	3.19
1080	320	0.00	1.43
2340	264	0.00	0.39
2410	278	0.98	1.41
2440	289	0.41	0.35

表 1 列出 KNRC 试验 No. 64 中各测点的浓度观测值和本文粒子模式计算值，可见两者之间是比较一致的。进一步的比较可以发现，约有 58% 的计算浓度位于观测值的

2 倍范围以内, 约有 80% 的计算浓度位于观测值的 3 倍范围以内. 图 1 为计算的地面浓度分布, 对横风向积分浓度用源高处风速、 Z_i 和 Q 无量纲化, 得到如图 2 示意的无量纲横风向积分浓度分布, 基本上反映了对流边界层中高架源扩散的一些特性, 如烟流轴线先下沉而后又抬升. 与 Deardorff 和 Willis^[5] 的水槽试验结果及其它模式计算结果仍有一定的差异, 我们认为这是由于试验时并不是理想的连续源, 而只释放一个时段造成的. 另外, 风和湍流观测资料的欠缺也是造成差异的原因之一.

由此可见, 这里所建模式用于模拟对流边界层中的扩散是比较成功的, 而且模式适用于非定常、非均匀的实际大气条件.

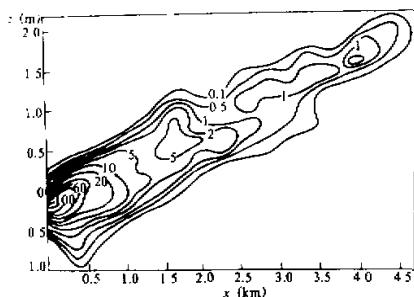


图 1 计算的地面浓度分布 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)

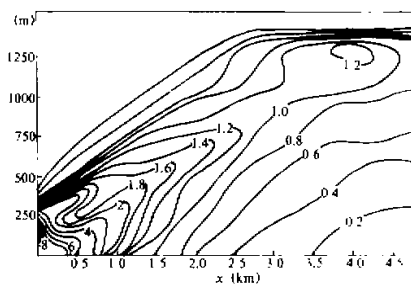


图 2 无量纲横风向积分浓度分布

三、模拟沿岸陆上熏烟扩散的随机游动模式

用随机游动模式模拟熏烟扩散是新近提出的一种有效途径, Luhar 等人^[6]曾作过研究, 他们的模式比较复杂, 用到湍流的三阶矩 (这常常是难以得到的); 而且假设粒子在进入内边界层之前呈高斯型扩散, 在与内边界层相截处有一经验确定的初始扩散幅, 然后使用粒子随机游动模式. 本文则从粒子释放开始便使用随机游动扩散模式, 粒子与界面相截后进入内边界层, 由对流运动带至地面, 然后在内边界层顶和 $Z_0/4$ 参考高度之间不断被反射. 同时考虑内边界层顶不规则夹卷界面的作用.

实验发现, 内边界层界面处存在局地变化, 界面并非光滑增长曲线, 而是如图 3 所示的起伏形式^[7], 即混合层顶是随时间变化的. 图 3 中 H_e 代表有效源高, L_2 , L_0 分别为不规则夹卷界面的上下包络线, $L(x)$ 为平均的夹卷界面 (如随下风距离呈抛物线型变化). 当烟流与夹卷界面相遇时, 开始仅有少部分被夹卷混合向下, 只有当烟流与 L_0 相遇时才会一起被夹卷进入内边界层. 设 $\Delta Z_i = L_2 - L_0$, 据 Deardorff 和 Willis^[5] 的观测, 得

$$\frac{\Delta Z_i}{Z_i} = 0.2 + 4 \frac{w_e}{w_*}, \quad (8)$$

式中 w_e 为内边界层界面高度的向上增长率. 模拟中考虑粒子以等几率与高度在 L_2 和 L_0 之间的界面相截.



图 3 不规则夹卷界面示意图

与前节所述模式的另一不同之处是考虑了 σ_u^2 的水平不均匀性, 即在 u' 的 Markov 关系中加上了类似于 w' 方程中最后一项的飘移速度, 这在界面附近是重要的.

模拟中将垂直剖面分为三个区域, 分别具有不同的湍流特性. 内边界层界面以外, 假设为稳定条件, 湍流脉动速度标准差和拉格朗日时间尺度取如下形式^[2]:

$$\frac{\sigma_u}{u_*} = 2 \left(1 - \frac{Z}{Z_i} \right), \quad (9)$$

$$\frac{\sigma_w}{u_*} = \frac{\sigma_v}{u_*} = 1.3 \left(1 - \frac{Z}{Z_i} \right),$$

$$T_{tu} = \frac{0.15 Z_i}{\sigma_u} \left(\frac{Z}{Z_i} \right)^{0.5},$$

$$T_{tv} = \frac{0.07 Z_i}{\sigma_v} \left(\frac{Z}{Z_i} \right)^{0.5}, \quad (10)$$

$$T_{tw} = \frac{0.10 Z_i}{\sigma_w} \left(\frac{Z}{Z_i} \right)^{0.8}.$$

内边界层中的湍流脉动速度标准差取如下形式^[4]:

当 $\frac{Z}{Z_i} < 0.1$ 时,

$$\frac{\sigma_u}{u_*} = \left[12 + 0.5 \left(-\frac{Z_i}{L} \right) \right]^{1/3} = \frac{\sigma_v}{u_*}, \quad (11)$$

$$\frac{\sigma_w}{u_*} = 1.3 \left[1 + 3 \left(-\frac{Z}{L} \right) \right]^{1/3}.$$

当 $\frac{Z}{Z_i} > 0.1$ 时,

$$\sigma_u = \sigma_v = \sigma_w = 0.6 u_*, \quad (12)$$

而拉格朗日时间尺度的参数化与上节所述方案相同. 式中 u_* 为摩擦速度 (m/s), 其它量的物理意义如前.

利用楠蒂科克沿岸熏烟扩散试验的观测资料 (见表 2), 模拟了两个不同时刻的地面 SO_2 的轴线浓度分布, 计算结果分别如图 4 (12:00) 和图 5 (16:00) 所示. 图中还给出了外场试验观测值以及模拟熏烟扩散的 Misra 模式、Misra 修正模式、Deardorff 和 Willis 模式的预测结果^[7]. 从图 4 看出, Misra 模式预测的浓度比实测值高出 14%, 最大浓度出现位置一致; 而本模式模拟的最大值位置与实测比较一致, 浓度值则比实测高出约 20%. 由图 5 可见, Misra 模式预测的最大浓度位置与实测一致, 但最大值比实测浓度低 15%; 而本模式预测的最大值与实测较为一致, 但最大值的出现位置略有偏移. 由图 4 和图 5 中各个熏烟扩散预测模式结果的横向比较来看, 我们的粒子随机扩散模式

表 2 楠蒂科克试验条件 (1978 年 6 月 6 日)

模式输入参数	12:00	16:00
内边界层高度 Z_1 (m)	$3.16x^{1/2}$	$5.60x^{1/2}$
无量纲对流速度 $\frac{w^*}{U}$	0.18	0.25
风速 U (m/s)	7.5	6.4
有效源高 (m)	370	398
源强 Q (g/s)	4181	6031

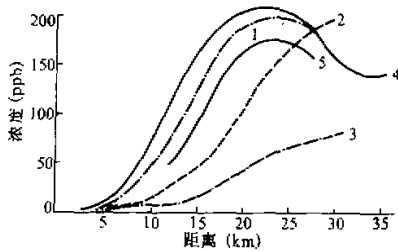


图4 12:00 的 SO_2 地面轴线浓度分布

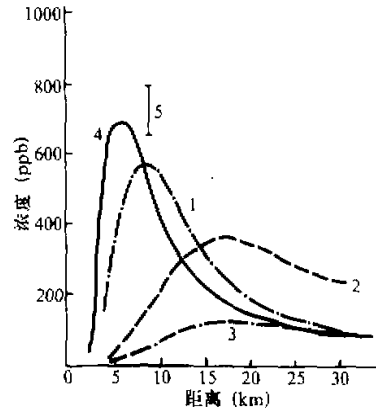


图 5 16:00 的 SO_2 地面轴线浓度分布

以及 Misra 模式的预测与实测最接近。尽管 Misra 修正模式以及 Deardorff 和 Willis 模式作了较为详细的考虑，诸如下沉修正和逐渐混合修正，但从两个时刻的浓度分布的模拟结果看，这两个模式的模拟性能并无明显改善。

由上述分析可以看出，我们的粒子随机游动模式用于模拟沿岸熏烟扩散特征是可行的，而且是实用的，模拟结果偏安全。我们认为模拟结果与实测的差异可能是由于模式中未考虑风切变、烟流抬升、沉积和化学转化等实际因素，而且湍流场也是用经验廓线所致。

四、结 语

本文建立了一个三维的粒子随机游动扩散模式，成功地模拟了对流边界层中的扩散，并应用于沿岸地区高架点源的熏烟扩散的计算处理，与实际观测资料吻合较好。粒子随机游动模式用于描述对流边界层中的扩散以及沿岸熏烟扩散是可行而实用的。目前，大多数熏烟预测模式是以高斯型扩散为基础，并假定内边界层界面光滑地增长，夹卷烟流瞬间即完全垂直混合。这些假设是不甚合理的，将会造成污染物地面浓度的不精确预测。而粒子的随机游动方法是拉格朗日型的，它可以简便而恰当地模拟一些特殊的实际大气行为，如熏烟重返等现象，并且可以避免大多数熏烟扩散模式中的假设，因而对熏烟

扩散研究具有良好的应用前景。我们认为模式模拟性能的好坏直接取决于模式输入参数尤其是湍流量引入的准确性和合理性，这也正是实施模式完善的研究方向。另外，边界上的反射处理以及烟流抬升等物理化学过程的处理还有待作进一步的研究。

参 考 文 献

- [1] Thomas P., Hubschmann W., Schüttelkopf H. et al., 1983, Experimental determination of the atmospheric dispersion parameters at the Karlsruhe Nuclear Research Center for 160m and 195m emission heights, Part 1: Measured data, kfk 3456, 96—102.
- [2] Hanna S.R., 1982, Applications in air pollution modeling, in *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling*, chapter 7 (edited by F. T. M. Nieuwstadt and H. Van Dop), Reidel, Dordrecht, 275—310.
- [3] Brusasca G., Tinarelli G. and Anfossi D., 1989, Comparison between the results of a Monte Carlo atmospheric diffusion model and tracer experiments, *Atmos. Environ.*, **23**(6), 1263—1280.
- [4] Weil J. C., 1988, Dispersion in the convective boundary layer. *Lectures on atmospheric dispersion modeling*, chapter 4 (edited by Venkatram A. and Wyngaard J. C.), AMS., Boston, 167—221.
- [5] Deardorff J. W. and Willis G. E., 1982, Ground-level concentrations due to fumigation into a entraining mixed layer, *Atmos. Environ.*, **16**(5), 1159—1170.
- [6] Luhar A. K., Britter R. E., 1990, An application of Lagrangian stochastic modeling to dispersion during shoreline fumigation, *Atmos. Environ.*, **24a**(4), 871—881.
- [7] 周如明、蒋维楣等, 1989, 沿岸地区大气输送和扩散研究, 南京大学出版社, 84—110.

A Stochastic Model for Prediction of Fumigation Dispersion over Coastal Area

Yu Hongbin Jiang Weimei

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

Abstract

In this paper, a random walk model for dispersion in the convective boundary layer is set up and verified by the data of KNRC Experiment No.64. Then the model is modified, considering the effects of irregular entrainment interface on the top of IBL, and applied to fumigation dispersion over Nanticoke coastal area. The simulated ground-level centerline concentration of SO_2 is compared with the data of observation and the results of three fumigation dispersion models. It is showed that model performances are pretty good. The model can be run on microcomputers, so it is also practical.

Key words: Stochastic modeling; Convective boundary layer; Internal boundary layer; Fumigation dispersion; Entrainment.