

МЕТОДИКИ И ПРОГРАММЫ ДЛЯ РАСЧЕТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ
ПОЛИДИСПЕРСНОЙ ПРИМЕСИ В АТМОСФЕРЕ

М.И.Авраменко, Е.С.Андреев, А.П.Васильев, В.Ю.Гусев, М.Ю.Козманов,
В.Ф.Куропатенко, Е.Б.Рачилов, В.А.Симоненко

(ВНИИТФ)

Описаны особенности применяемых методик и возможности программ *ECOL*, *TREC*,
RIM, предназначенных для расчета распространения примесей в атмосфере.
Приведены примеры численных расчетов.

В в е д е н и е

Задачам распространения загрязняющих примесей в атмосфере посвящено большое число работ. Отметим лишь некоторые: [1-7] и библиографию к ним. Используя некоторые свойства методик [1-7] и более мощную вычислительную технику, чем та, которая имеется в большинстве организаций СНГ, занимающихся расчетами переноса примесей, авторы разработали методику и создали программу *ECOL* для достаточно точного решения трехмерного уравнения атмосферной диффузии. Вопрос о точности численного решения существует, несмотря на достаточную неопределенность коэффициентов турбулентной диффузии примесей. Разностные методы, основанные на центральной разности и ее монотонных модификациях [8], применяемые в [1] и в [5], дают большую погрешность при больших скоростях ветра и могут проигрывать инженерным методикам или некоторым модификациям метода моментов не только по времени счета, но и по точности получаемых результатов. В ряде случаев точность схем, основанных на центральной разности, просто неприемлема. Модельная задача, иллюстрирующая это утверждение, приведена в разделе 5.

Из разностных методов, практически не допускающих счетного размывания облака выброса, можно выделить два: метод частиц и метод характеристик [9,10].

Неплохой результат дают и методы Монте-Карло [2,3], о чем говорит и тот факт, что научно-производственное объединение "Тайфун" не ограничилось применением схем с центральной разностью.

Авторы рассмотрели и опробовали как метод характеристик, так и метод частиц. Метод частиц при недостаточном их числе может привести к нарушению принципа максимума на стадии переноса (стадия диффузии монотонна). Положение края облака определяется с точностью до ячейки. Метод характеристик монотонен, но не-

консервативен, и для его реализации (см. раздел 2), требуются большие, чем для метода частиц, затраты оперативной памяти.

Предпочтение в основном варианте программы *ECOL* было отдано методу частиц.

Все разностные методы имеют общий недостаток: они достаточно дороги. В ряде случаев, например, для плоского рельефа, для мгновенного источника значительно эффективней методы типа метода моментов [7,11], а для задач переноса на небольшие расстояния — инженерные методики. В настоящее время во ВНИИТФ эксплуатируются три программы: *RIM* — реализующая инженерную методику, *TREC* — метод моментов, *ECOL* — разностные методики (метод частиц).

1. Метод частиц (программа *ECOL*)

Распространение загрязняющих примесей в атмосфере описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + \frac{\partial (v_x c_m)}{\partial x} + \frac{\partial (v_y c_m)}{\partial y} + \frac{\partial [(v_z - W_m) c_m]}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial c_m}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \nu \frac{\partial c_m}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial c_m}{\partial z} + Q, \quad (1)$$

где v_x, v_y, v_z — компоненты скорости ветра, зависящие от времени и пространственных координат; c_m — концентрация аэрозолей диаметром d_m (m -я фракция); W_m — скорость гравитационного оседания аэрозолей m -й фракции; μ и ν — коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии соответственно. Они вычисляются в соответствии с рекомендациями [12]; $Q(x, y, z, t)$ — мощность источника.

Краевые условия берутся так же, как в [1]:

$$\nu \frac{\partial c_m}{\partial z} = \beta_0 c_m \Big|_{z=0}, \quad (\beta_0 + W_m) - \text{скорость сухого осаднения}; \quad c_m \Big|_{z=-\infty} = 0.$$

Рельеф учитывается ступенчатой функцией.

Для описания переноса воспользуемся методом расщепления [9]. На первом этапе на каждом шаге

по времени будем решать уравнение переноса

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + \frac{\partial (v_x c_m)}{\partial x} + \frac{\partial (v_y c_m)}{\partial y} = 0 \text{ при всех } z,$$

на втором этапе — уравнение

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + \frac{\partial [(v_x - w_m) c_m]}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial c_m}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial c_m}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial c_m}{\partial z} + Q.$$

Перенос на первом этапе реализуется с помощью частиц в классической форме: вводится прямоугольная сетка, в каждой ячейке в начальный момент заводятся частицы с общей массой, равной массе ячейки, считается фактическое координаты частиц и их местонахождение. Для достаточной точности передачи оседания и загрязненности необходимо, чтобы за шаг по времени частица не проходила больше одной ячейки. Учет скорости оседания перенесен на второй этап, так как $\frac{w_m h_z}{2}$ (h_z — шаг по переменной z) сравнимо (или меньше) по величине с ν , что существенно облегчает учет эффектов переноса, и в то же время значительно сокращается число частиц, необходимых для обеспечения монотонности загрязненности подстилающей поверхности.

На втором этапе реализована стандартная неявная схема для диффузионного члена. Перенос считается по схеме первого порядка с простейшей антидиффузионной добавкой, не нарушающей монотонности. Добавка уточняет схему первого порядка точности, если $\frac{w_m h_z}{2}$ сравнимо с ν или меньше ν .

Если точность описания оседания частиц будет неудовлетворительной, то можно перенести учет оседания в первый этап и увеличить число частиц.

Массы частиц, находящихся в ячейке после второго этапа, изменяются пропорционально изменению масс ячеек, в которых они находятся.

Если по завершении второго этапа появилась концентрация в ячейке, в которой на предыдущем шаге она была равна нулю, то в этой ячейке заводятся новая частица.

Сетка для второго этапа — виллерова прямоугольная, по x , y — предпочтительно равномерная, по z — произвольная. Выбор равномерной сетки связан только с облегчением интерполяции при перестройке сетки по x и y . Сетка сдвигается, следуя положению облака, при необходимости расширяясь (аналогично [1]). Загрязненность выдается на фиксированной сетке.

Программа *ECOL* может работать на Э-2 или РС 486 с 16-мегабайтной памятью, при этом на РС для описания аэрозольного облака используется $60 \times 60 \times 60$ ячеек. При меньших требованиях к точности описания облака можно использовать и 4-мегабайтную РС 486.

2. Метод характеристик

Рассмотренный нами вариант метода характеристик для уравнения (1) близок по идеологии

к методу частиц. Продемонстрируем его на модельном уравнении $\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ (рис. 1).

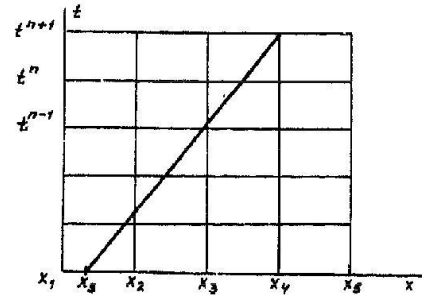


Рис. 1. Расчетная сетка

Соотношение на характеристике имеет вид

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = 0,$$

где u^s — значение искомой функции на конце характеристики в момент времени t^s в точке x_s . Точка x_s лежит между двумя узлами сетки (на рис. 1 это первый и второй узлы сетки), расстояние между которыми равно Δx . Если $v \cdot \Delta t > n \cdot \Delta x$, то, вычисляя u^s сдвигом соответствующего значения из ближайшей точки, получаем погрешность $\frac{v \Delta t}{n} \cdot 100$, при $n = 5$ погрешность в скорости составляет всего 10% (в двумерном случае — по направлению). По сути дела, мы, как и в методе частиц, следим за частицей, исходя из ее начального положения. При $v \tau > n h$, $n = 5$ модельное уравнение рассчитывается достаточно точно, но возникают трудности при учете оседания и загрязненности.

При малых τ и больших Δt нужно хранить концентрацию на большом числе слоев дополнительно, так как ветер по высоте может меняться в несколько раз. Для метода характеристик выполняется принцип максимума, но при реализации метод требует большую дополнительную память, чем метод частиц, и, кроме того, он неконсервативен.

С учетом сказанного было решено первой рабочей версией программы сделать версию, реализующую метод частиц.

3. Программа RIM

Программа *RIM* предназначена для расчета приземных концентраций неветероносных загрязняющих примесей в атмосфере, а также загрязнения подстилающей поверхности. Расчеты производятся по формулам модифицированной гауссовой модели для мгновенного либо непрерывного (постоянного по времени) источника. Учитывается обднение облака загрязняющих примесей за счет сухого оседания. Входящие в отчетные формулы эффективная высота источника и средняя скорость ветра могут либо задаваться, либо рассчитываться по входной метеоинформации и параметрам источника (таким, как мощность взрыва, приведшего к образованию загрязняющего облака, и др.). Дис-

персии, характеризующие скорость расплывания облака вдоль и поперек направления ветра (σ_x, σ_y) и по высоте (σ_z), вычисляются следующим образом: $\sigma^2(x) = \sigma^{(0)2} + \sigma^{(1)2}(x)$, где $\sigma^{(0)}$ — начальные дисперсии. Для величин $\sigma^{(1)}(x)$, зависящих от класса устойчивости атмосферы и шероховатости подстилающей поверхности, заведена библиотека, включающая в себя данные Гиффорда и формулы Смита-Хоскера.

4. Программа TREC

Программа TREC основана на использовании метода моментов [11]. Решение трехмерного уравнения атмосферной диффузии записывается в обобщенной гауссовой форме, а для входящих в нее параметров решается система дифференциальных по x и t уравнений³⁶. Полученные методом моментов уравнения решаются методом частиц.

Программа TREC предназначена для оперативных расчетов распространения полидисперсной примеси в атмосфере от мгновенного источника. Имеется также возможность моделирования длительно действующего источника как последовательности мгновенных.

В программе учитываются перенос аэрозолей произвольно заданным нестационарным ветровым полем, турбулентная диффузия и гравитационное оседание. Имеется возможность задания стандартного ветрового поля в атмосферном пограничном слое, соответствующего определенным погодным условиям. В этом случае входной метеоинформацией служат время года, класс устойчивости атмосферы, скорость ветра на высоте флага и шероховатость подстилающей поверхности. Рассчитывается оседание полидисперсной примеси на подстилающую поверхность, которая считается плоской с кусочно-постоянной скоростью сухого оседания.

Применяемый математический метод отличается высокой эффективностью и освобожден от численной диффузии. Вывод результатов расчетов осуществляется в виде таблиц и графиков.

5. Примеры численных расчетов

Задача I. Продемонстрируем низкую точность разностных схем с односторонней разностью и даже с центральной разностью, а также схемы В.О.Ильина [8] при описании ветрового переноса примесей в атмосфере. С этой целью рассмотрим простейшую одномерную задачу Коши для уравнения переноса

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = 0$$

³⁶Такой подход к решению уравнения атмосферной диффузии использовался ранее В.В.Судаковым.

с заданным начальным распределением

$$c(x, 0) = \frac{q}{\sigma_x^3 \sqrt{2\pi^3}} \cdot \exp\left\{-0,5 \cdot \left(\frac{x-10}{\sigma_x}\right)^2\right\},$$

где q, σ_x — заданные константы. Данное распределение является типичным в задачах распространения примесей в атмосфере. Решалась задача со следующими входными данными: $v = 40$ км/ч, $q = 10$ Ки, $\sigma_x = 0,3$ км.

Результаты расчетов по схеме Ильина, по схемам с центральной и односторонней разностью на момент времени $t = 0,25$ ч приведены на рис. 2, а, б, в соответственно. Как видно из рисунков, уже через 0,25 ч счетное размазывание переносимого профиля весьма велико. Еще более катастрофично размазывание на момент времени 1 ч (рис. 3, а, б, в). Из рис. 4 видно, что даже самая лучшая из рассматриваемых схем — схема из [8] — на момент времени 2 ч дает неудовлетворительные результаты. Для сравнения на графиках приведена кривая решения, полученная с помощью метода частиц: она полностью совпадает с точным решением.

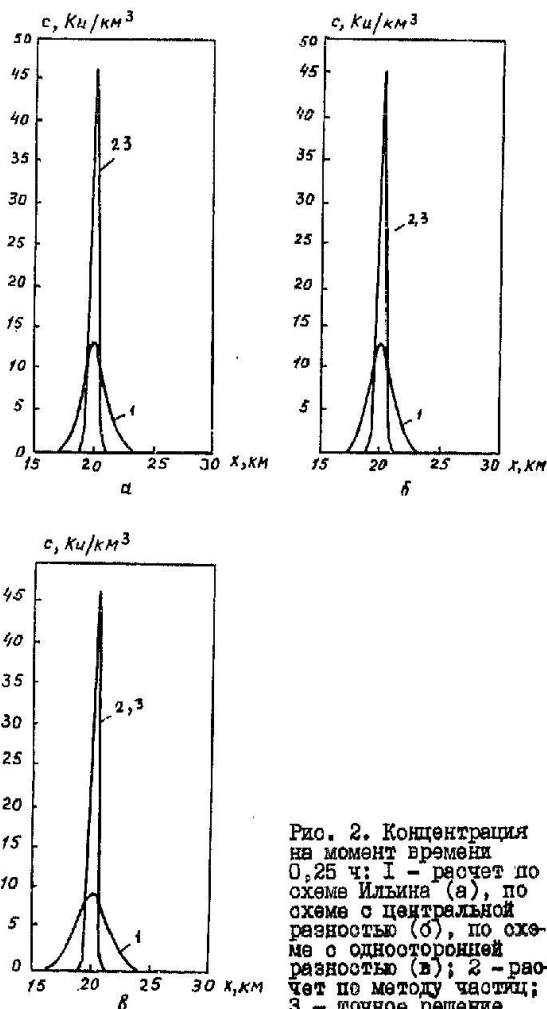


Рис. 2. Концентрация на момент времени 0,25 ч: 1 — расчет по схеме Ильина (а), по схеме с центральной разностью (б), по схеме с односторонней разностью (в); 2 — расчет по методу частиц; 3 — точное решение

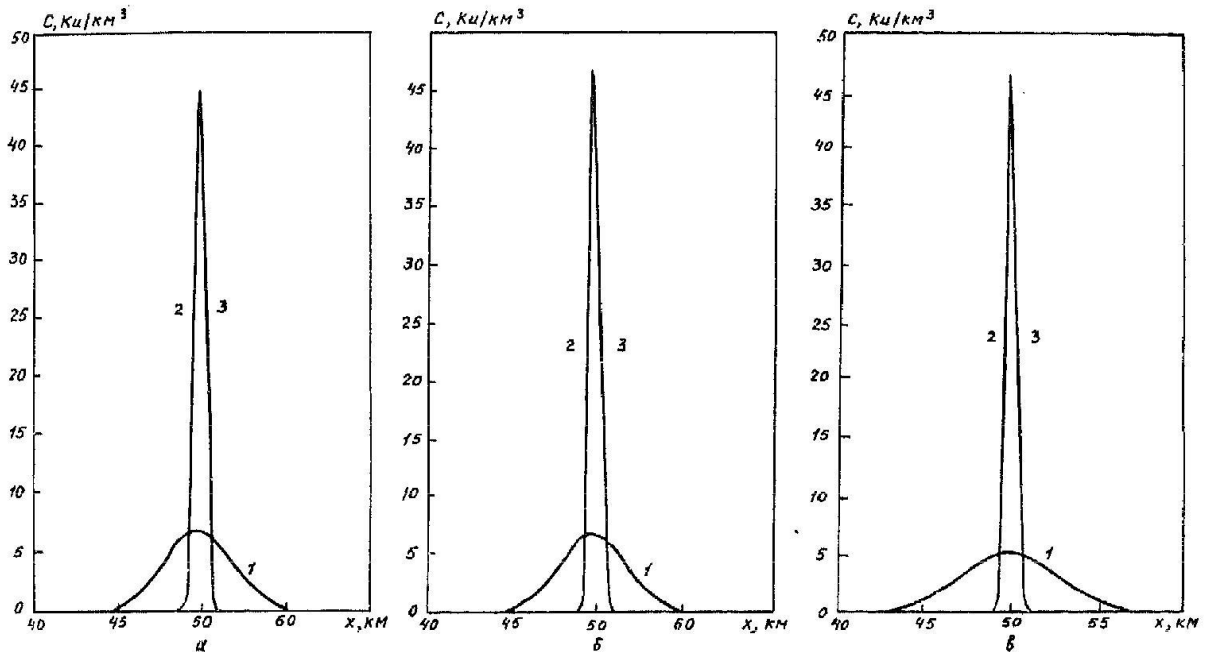


Рис. 3. Концентрация на момент времени 1 ч: 1 - расчет по схеме Ильина (а), по схеме с центральной разностью (б), по схеме с односторонней разностью (в); 2 - расчет по методу частиц; 3 - точное решение

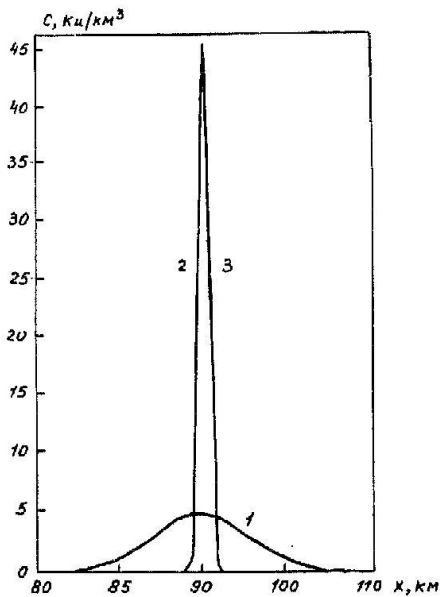


Рис. 4. Концентрация на момент времени 2 ч: 1 - расчет по схеме Ильина; 2 - по методу частиц; 3 - точное решение

Задача 2. Для проверки работоспособности программы *ESOL* была сосчитана модельная задача: задан плоский рельеф, одна фракция примеси, одна область для коэффициентов диффузии. Горизонтальный коэффициент турбулентной диффузии $\mu = 0,14 \text{ км}^2/\text{ч}$, вертикальный коэффициент диффузии $\nu = 0,072 \text{ км}^2/\text{ч}$, скорость ветра $V = 10 \text{ м/с}$, азимут $\varphi = 270^\circ$, коэффициент в граничном условии $\beta_0 = 0,036 \text{ км}^2/\text{ч}$. Вертикальная скорость

оседания примеси $W_x = 1,88 \text{ км/ч}$, что соответствует диаметру аэрозолей $\approx 100 \text{ мкм}$ при плотности $\approx 2 \text{ г/см}^3$. Начальное распределение концентраций задано формулой

$$C = \frac{a}{\sqrt{8\pi^3} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right).$$

Высота источника $z_0 = 0,5 \text{ км}$, $\sigma_x = \sigma_y = 0,3 \text{ км}$, $\sigma_z = 0,2 \text{ км}$, $a = 60000 \text{ кг}$.

Распределение загрязненности вдоль оси следа приведено на рис. 5.

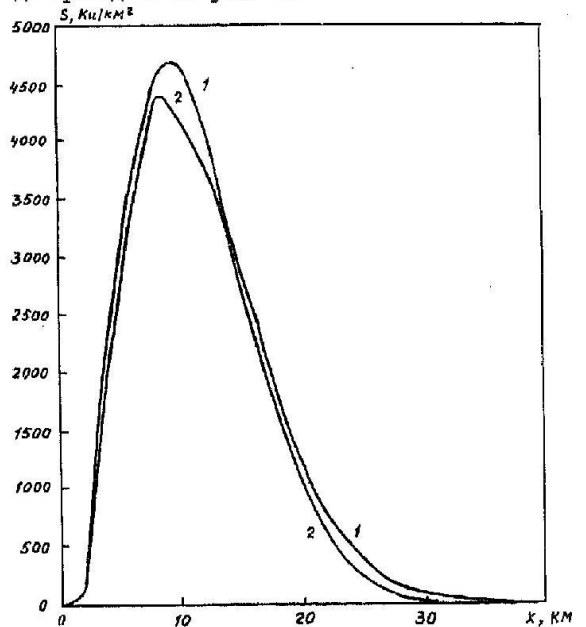


Рис. 5. Загрязненность на момент времени 1 ч: 1 - расчет по методу частиц; 2 - по методу моментов; $x_{\text{max}} = 9,6$; $C_{\text{max}} = 4671$

Задача 3. Коэффициенты диффузии, скорость и направление ветра определялись из [12]. Ветер задан на высоте флага: скорость - 5 м/с, направление - 246° , четвертый класс устойчивости атмосферы, теплое время года. Рассчитывалось 20 фракций примеси. Начальное распределение концентрации аэрозолей каждой фракции задавалось формулой, аналогичной используемой в задаче 2. Высота источника $Z_{из} = 0,7$ км, суммарная активность $a = \sum_m a_m = 60000$ Ки, рельеф плоский, коэффициент сухого оседания $\beta = 0,036$ км/ч, $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = 0,1$ км, a_m - активность аэрозолей m -й фракции, рассчитываемая по усеченному логнормальному закону с медианным распределением $d_0 = 75$ мкм, дисперсией распределения 0,18. Средние диаметры

частиц во фракциях [мкм]: 5,15,25,35,45,55,65,75,85,95,110,130,150,170,190,210,230,250,270,290. Соответствующие значения a_m равны: 0,0354; 42,96; 770,26; 3072,6; 5962,4; 7876,4; 8329,3; 7682,7; 6490,9; 5174,8; 6929,3; 3743,8; 1937,9; 986,83; 501,48; 256,32; 13,237; 69,22; 36,71; 19,75.

Такая постановка задачи приближенно моделирует образование Восточно-Уральского радиационного следа (ВУРС).

На графиках приведены загрязненности вдоль оси следа, полученные по программе *TREC* (рис. 6, а, б) и *ECOL* (рис. 6, в, г), в сравнении с экспериментальными данными.

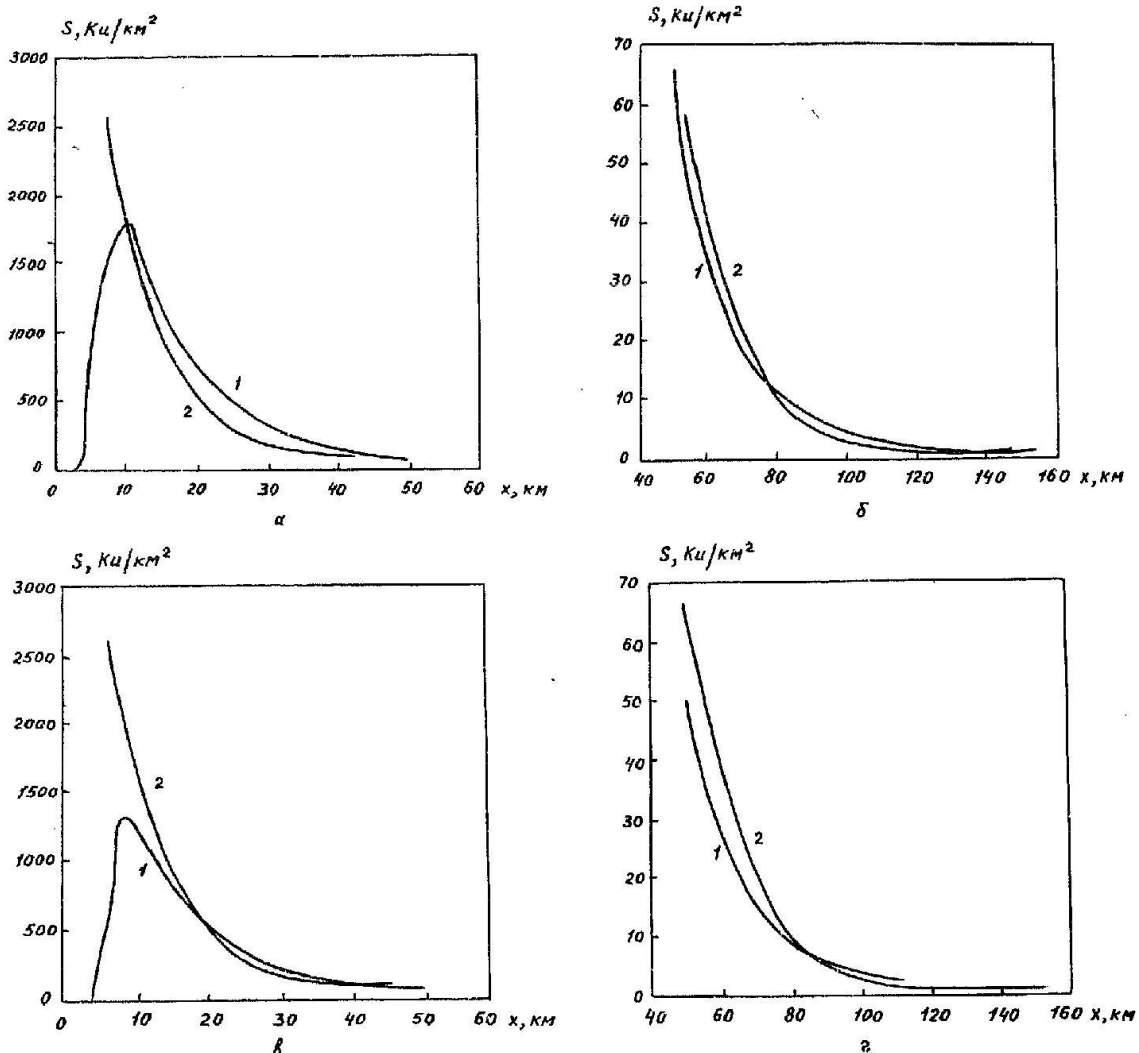


Рис. 6. Загрязненность вдоль оси следа: 1 - расчет по программе *TREC* (а, б), по программе *ECOL* (в, г); 2 - экспериментальные данные

С п и с о к л и т е р а т у р ы

1. Б о р а и л о в В.А., В а л ь т и щ е - в а Н.С., К л е п и к о в а Н.В. и др. Региональная модель переноса полидисперсной примеси// Метеорология и гидрология. 1988, № 4.
2. К а н д и е в Я.З., К у р о п а т е н - к о Э.С., Л и ф а н о в а И.В. и др. Расчет методом Монте-Карло взаимодействия частиц с веществом в программе ПРИЗМА// Тез.докл. 3-й Всес. научной конференции по защите от концентрированных излучений ядерно-технических установок. 27-29 октября 1981. Томск, 1981. С. 24.
3. И в а н о в Н.В., П и с к у н о в В.Н. Моделирование процессов переноса и осаждения аэрозольных частиц методом Монте-Карло// Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 73-78.
4. Ч е р н о б ы л ь: радиоактивное загрязнение природных сред / Под ред. Ю.А.Израэля. М.: Гидрометеоиздат, 1990.
5. М а р ч у к Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982.
6. Ц е н е н к о В.В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. М.: Гидрометеоиздат, 1981.
7. К о с т р и к о в А.А. Модель дальнего переноса примеси// Метеорология и гидрология. 1988. № 11.
8. И л ь и н В.О. Анализ конечно-разностных схем численного решения уравнения адвекции// Там же. № 6.
9. А н у ч и н а Н.П., Б а б е н к о К.И., Г о д у н о в С.К. и др. Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики. М.: Наука, 1979.
10. L a n g e R. ADPIC - A three-dimensional particle-in-cell model for the dispersion of atmospheric pollutants and its comparison to regional tracer studies// J. Appl. Meteor. 1978. Vol. 17. P. 320-329.
11. М о н и н А.С., И г л о м А.М. Статистическая гидромеханика. М.: Наука, 1966.
12. Атмосфера. Справочник / Под ред. В.С.Седунова. М.: Гидрометеоиздат, 1991.

Статья поступила в редакцию 11.11.93.