УДК 551.510.72:551.510.522:551.61

В.М.Волощук, О.Я.Скриник

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ТУРБУЛЕНТНОЙ ДИФФУЗИИ ГАЗО-АЭРОЗОЛЬНОЙ ПРИМЕСИ В АТМОСФЕРЕ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА-ПЛАНКА

Предлагается параметризация процесса турбулентного перемешивания на основе уравнения Фоккера-Планка для анализа физических особенностей турбулентной диффузии газо-аэрозольной примеси за пределами заведомой применимости полуэмпирической К-теории. Получено функциональное преобразование этого уравнения для начальных задач Коши, существенно облегчающее проведение анализа особенностей вертикальной турбулентной диффузии локальных образований газо-аэрозольной примеси в пограничном слое атмосферы, образующихся, в том числе, в результате аварий на крупных атомных, химических или нефтеперерабатывающих предприятиях.

Введение

При решении прикладных задач по исследованию вертикальной турбулентной диффузии локальных образований газо-аэрозольной примеси в пограничном слое атмосферы обычно используется *полуэмпирическая К-теория.* Основная цель предлагаемой статьи - выяснить, какую новую физическую информацию об особенностях турбулентного перемешивания атмосферной примеси (по сравнению с традиционно используемой *К-теорией)* содержит двухпараметрическое описание турбулентной диффузии, базирующееся на использовании уравнения Фоккера-Планка.

Чтобы не "затемнять" анализ исследования учетом влияния дополнительных факторов, оценка которых при решении конкретных прикладных задач – тривиальна, в дальнейшем будут рассматриваться только наиболее простые физические ситуации. Заметим, что переход к параметризации турбулентного обмена с использованием уравнения Фоккера-Планка означает явное введение в рассмотрение лагранжевого масштаба турбулентности τ (характерного времени «жизни» турбулентных молей). Предполагаем, что это может во многих случаях резко расширить границы применимости предлагаемой параметризации турбулентной диффузии по сравнению *с полуэмпирической К-теорией*, корректное использование которой, как известно, требует обязательного осреднения рассматриваемых процессов по промежуткам времени, порядка τ.

Основные условия применимости полуэмпирической К-теории

При решении различных прикладных задач по турбулентной диффузии газо-аэрозольной примеси зачастую ограничиваются ситуацией, когда уравнение горизонтального переноса и турбулентной диффузии газо-аэрозольной примеси в атмосфере может быть представлено в виде [1, 2, 6]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + div\ c\left(\mathrm{u} - u_s \mathrm{e}_z\right) = I_{dif}\ , \qquad (1)$$

где t - время диффузии, u – вектор скорости горизонтального ветра и восходящих (или нисходящих) движений воздуха, u_s - скорость седиментации (установившегося падения в атмосфере) аэрозольных частиц, c - удельное содержание или иная характеристика газо-аэрозольной примеси, I_{dif} - слагаемое, описывающее поток газо-аэрозольной примеси в результате турбулентной диффузии.

Заметим, что довольно часто встречаются ситуации, когда в поперечном направлении (по отношению к горизонтальному ветру) либо имеет место пространственная однородность c, либо можно ограничиться осреднением c в этом направлении. Диффузией примеси в направлении горизонтального ветра обычно пренебрегают.

Наиболее распространенной параметризацией диффузионного слагаемого этого уравнения (особенно, в прикладных исследованиях, базирующихся на математическом моделировании процессов переноса и диффузии примеси) является так называемое градиентное приближение [1, 2, 6]:

$$I_{dif} = -div\,\mathbf{j}, \qquad \mathbf{j} = -\left(\mathbf{k}\nabla\right)c\,. \qquad (2)$$

Предположим, что $c \Rightarrow n$, где n обычно интерпретируется, как средняя концентрация частиц газо-аэрозольной примеси в момент времени t в дифференциально малой окрестности точки с радиус-вектором r. В частном случае, когда коэффициент диффузии k предполагается характеристикой только турбулентной среды, перемешивающей примесь, градиентное приближение (второе соотношение системы (2)) соответствует известной *полуэмпирической К - теории.* В общем же случае коэффициент диффузии k может зависеть и от характеристик турбулентной среды, и от текущих параметров перемешиваемого облака газо-аэрозольной примеси. Тогда градиентное приближение по форме согласуется с *К-теорий,* однако его физический смысл приобретает совсем другое значение.

Заметим, что главной особенностью градиентного приближения является его однопараметричность. Действительно, при его применении для описания турбулентной диффузии может быть использован, в принципе, лишь один параметр – коэффициент турбулентной диффузии k (в общем случае – *тензор*).

При использовании параметризации (2) основные трудности решения задачи турбулентной диффузии газо-аэрозольной примеси сосредотачиваются именно на проблеме определения коэффициента турбулентной диффузии k. В общем случае, как известно, параметр k является весьма сложным функционалом от пространственно-временных распределений средних полей скорости ветра и температуры воздуха. Преодолению этих трудностей посвящено огромное количество теоретических и экспериментальных работ [1, 3-5]. Однако, надо честно сказать, достаточной ясности в этом вопросе до сих пор нет, что, возможно, связано все же с принципиальными внутренними ограничениями этой параметризации.

Как известно, градиентное приближение для j заведомо применимо только тогда, когда пространственно-временные масштабы случайных флуктуаций поля скоростей частиц $\{L, \tau\}$, ответственных за их турбулентную диффузию, существенно меньше, чем пространственно-временные масштабы характерных изменений средней концентрации частиц газо-аэрозольной примеси $\{L_{ext}, \tau_{ext}\}$, а именно:

$$L << L_{ext}, \qquad \tau << \tau_{ext}. \tag{3}$$

Эти условия заведомо выполняются лишь для молекулярной диффузии. Но уже для броуновской диффузии достаточно тяжелых частиц (с достаточно большим временем их инерционного пробега) условия (3) не имеют места [7]. При рассмотрении же диффузии, вызванной турбулентными флуктуациями поля скоростей среды, условия (3) могут выполняться только в некоторых, довольно редких, предельных ситуациях. Поэтому возникает закономерный вопрос, как нужно было бы изменить параметризацию (2), чтобы выйти за пределы указанных жестких условий ее применимости.

Целесообразно также выяснить, только лишь к количественным расхождениям или и к нетривиальным с физической точки зрения различиям приводит широкое использование в прикладных исследованиях традиционной параметризации (2), причем без каких бы то ни было оговорок даже и в тех ситуациях, когда условия ее применимости (3) заведомо не выполняются.

Общая характеристика предлагаемой схемы двухпараметрического описания турбулентной диффузии

Среди предложенных к настоящему времени схем, уточняющих параметризацию (2) (довольно полный обзор приведен в [1, 6]), нам представляется наиболее прозрачным и с физической, и с методической точек зрения способ, базирующийся на использовании *уравнения Фоккера-Планка.*

Вводим в рассмотрение дополнительную случайную векторную переменную w, равную

$$\mathbf{w} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} - \mathbf{u},$$

где w – турбулентные флуктуации поля скоростей газо-аэрозольной примеси, u – средняя (по статистическому ансамблю индивидуальных турбулентных реализаций) скорость этой газо-аэрозольной примеси, r – радиус-вектор рассматриваемой «точки» примеси.

Турбулентная диффузия частиц в фазовом пространстве $\{r, w\}$ рассматривается, как марковский процесс (случайный процесс без «памяти»). При этом приращение $dw(t)$ за дифференциально малый промежуток времени dt представляется в виде двух слагаемых: регулярного члена wdt/τ (с отрицательным знаком) и случайного процесса $\delta w(t)$:

$$d\mathbf{w}(t) = -\mathbf{w}\frac{dt}{\tau} + \delta\mathbf{w}(t). \tag{4}$$

Предполагают, что случайный, процесс $\delta\mathbf{w}(t)$ – гауссов и приближенно (при усреднении по временным интервалам, превышающим dt) дельта-коррелирован, а именно:

$$\begin{aligned} &< \delta\mathbf{w}(t) >= 0, \qquad < \delta\mathbf{w}(t_1)\delta\mathbf{w}(t_2) >\sim dt \qquad при \qquad |t_1 - t_2| \le dt \\ &< \delta\mathbf{w}(t_1)\delta\mathbf{w}(t_2) >= o(dt) \qquad при \qquad |t_1 - t_2| > dt \\ &< \delta\mathbf{w}(t_1)\delta\mathbf{w}(t_2)\cdots\delta\mathbf{w}(t_n) >= o(dt) \qquad при \qquad n > 2, \end{aligned} \tag{5}$$

где угловыми скобками обозначено осреднение по статистическому ансамблю индивидуальных турбулентных реализаций процесса $\delta\mathbf{w}(t)$.

Такое описание турбулентной диффузии атмосферной примеси предполагает существование некоторого внутреннего времени τ_{int} (характерного лагранжевого времени корреляции турбулентных ускорений атмосферной примеси), удовлетворяющего условию (так называемому условию *иерархии времен* в статистической физике):

$$\tau_{int} << \tau << \tau_{ext} .$$

В дальнейшем будем рассматривать только двумерный вариант задачи в пространстве $\{x,z\}$, где ось аппликат направлена вертикально вверх, а ось абсцисс – по направлению горизонтального ветра. В поперечном к оси абсцисс направлении предполагается осреднение. Турбулентной диффузией вдоль оси абсцисс пренебрегаем. Обобщение полученных таким образом результатов не связано с особыми затруднениями – только при этом математические соотношения будут принимать более громоздкий вид.

В рассматриваемом случае второе соотношение системы (5) можно представить в виде:

$$< \delta w(t)\delta w(t) >= 2\sigma^2\frac{dt}{\tau}. \tag{6}$$

Вообще говоря, параметры σ и τ могут зависеть от переменных $z(t)$ и $w(t)$, однако здесь диффузия в фазовом пространстве $\{z,w\}$ будет рассматриваться как сугубо линейный процесс, поэтому зависимостью параметров σ и τ от переменных $z(t)$ и $w(t)$ будем в дальнейшем пренебрегать.

Таким образом, приводящее к диффузии примеси случайное поле скоростей частиц в данном исследовании параметризируется в виде:

$$dw(t) = -\frac{1}{\tau} w dt + \sigma \sqrt{\frac{2dt}{\tau}} G, \qquad (7)$$

где G – чисто случайная (гауссова) величина со средним, равным нулю, и дисперсией, равной единице.

Для броуновской диффузии тяжелых частиц предположение (7) вполне оправданно с физической точки зрения. Однако для турбулентной диффузии, рассмотрению которой и посвящена данная статья, это допущение является, возможно, довольно ограничительным, поэтому оно принято лишь с целью сделать дальнейшее рассмотрение проще и прозрачнее с физической точки зрения.

Уравнение Фоккера-Планка для турбулентной диффузии газо-аэрозольной примеси

При принятых выше предположениях в уравнении (1) основная характеристика газо-аэрозольной примеси c и диффузионный член I_{dif} преобразуются к виду:

$$\begin{aligned} & c \Rightarrow \psi(t, x, z, w) \\ & I_{dif} \Rightarrow -w \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial w}\left(w \psi + \sigma^2 \frac{\partial \psi}{\partial w} \right) \end{aligned} \qquad (8)$$

А это означает, что для описания вертикальной турбулентной диффузии газо-аэрозольной примеси можно использовать следующее соотношение (известное в физике случайных процессов уравнение Фоккера-Планка [5-7]):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} u_x \psi + \frac{\partial}{\partial z}(u_z - u_s)\psi = -w \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial w}\left(w \psi + \sigma^2 \frac{\partial \psi}{\partial w} \right). \qquad (9)$$

Здесь ψ *(t,x,z,w)* – унарная (одночастичная) функция распределения рассматриваемых частиц в их фазовом пространстве $\{z,w\}$ в момент времени t в дифференциально малой окрестности точки с абсциссой x.

Эта функция удовлетворяет естественному условию:

$$\psi \to 0 \text{ при } \quad |w| \to \infty. \qquad (10)$$

Таким образом, исследование вертикальной турбулентной диффузии в атмосфере сводится к решению задачи для уравнения при условии (10). Если функция ψ определена, то концентрация *n* и диффузионный поток *j* газо-аэрозольной примеси могут быть оценены с помощью очевидных соотношений:

$$\psi \;\Rightarrow\; n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi\left(t, x, z, w\right) dw\,, \qquad j = \int_{-\infty}^{\infty} w\, \psi\left(t, x, z, w\right) dw\,. \tag{11}$$

Уравнение Фоккера-Планка для функции ψ при предположениях (5) нетрудно получить, воспользовавшись давно разработанной и глубоко обоснованной *А. Н. Колмогоровым* [6] процедурой получения дифференциальных уравнений для описания стохастических процессов.

Фурье–трансформация уравнения Фоккера-Планка

Для дальнейшего уравнение (9) целесообразно упростить с помощью преобразования Фурье по переменной *w*. Введем обозначение

$$\phi\left(t, x, z; \lambda\right) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\lambda w} \psi\left(t, x, z, w\right) dw\,, \tag{12}$$

где λ - произвольный действительный параметр ($-\infty < \lambda < +\infty$).

Отметим, что

$$\begin{gathered} n\left(t, x, z\right) = \phi\left(t, x, z; 0\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi\left(t, x, z, w\right) dw\,, \\ j\left(t, x, z,\right) = -i \left.\frac{\partial \phi}{\partial \lambda}\right|_{\lambda = 0} = \int_{-\infty}^{\infty} w\, \psi\left(t, x, z, w\right) dw \end{gathered}\,. \tag{13}$$

Используя тривиальные соотношения

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\lambda w} w\, \psi\, dw = i \frac{\partial \phi}{\partial \lambda}, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\lambda w} \frac{\partial \psi}{\partial w} dw = i\lambda \phi\,,$$

из соотношения (9) после несложных преобразований получаем следующее уравнение для *фурье-трансформанты* (по переменной *w*) функции $\psi(t, x, z, w)$:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} u_x \phi + \frac{\partial}{\partial z}\left(u_z - u_s\right)\phi = \\ &\qquad = -\left(i \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\lambda}{\tau} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \lambda} - \frac{1}{\tau} \lambda^2 \sigma^2 \phi \end{aligned}\,. \tag{14}$$

Следует сказать, что идея параметризации турбулентной диффузии примеси с помощью уравнения Фоккера-Планка ни в коем случае новой не является. Она, как говорится, «лежит на поверхности» и, насколько нам известно, предлагалась многими исследователями. Однако реализации этой идеи препятствовали чрезвычайные трудности, с которыми исследователи столкнулись при анализе уравнения Фоккера-Планка. В данной статье предлагается некоторое функциональное преобразование начальной задачи для уравнения Фоккера-Планка, позволяющее, как нам представляется, в какой-то мере преодолеть эти трудности.

Функциональное преобразование начальной задачи для уравнения

Рассмотрим следующую “начальную” задачу для уравнения (9):

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_o} n_o(z) e^{-w^2/2\sigma_o^2} \qquad \text{при } t=0,\ x=0. \qquad (15)$$

В этом случае начальное условие для уравнения (14) примет вид:

$$\phi = n_o(z) e^{-\lambda^2 \sigma_o^2/2} \qquad \text{при } t=0,\ x=0. \qquad (16)$$

Предположение о нормальном (гауссовом) распределении примеси по переменной w в «начальный» момент времени не является, вообще говоря, существенно ограничительным. Гауссово распределение - единственное решение стохастического уравнения (4) при естественном предположении, что для этого уравнения нужно рассматривать задачу без «начальных» условий [7]. В иных случаях пришлось бы прилагать какие-то дополнительные усилия при формировании газо-аэрозольного облака в атмосфере для преддиффузионного (кинетического) периода.

В соответствии с условием (16) решение уравнения (14) для «начальной» задачи будем искать в виде:

$$\phi(t,x,z;\lambda) = \Omega(t,x,z;\lambda) e^{-\lambda^2\sigma^2/2}. \qquad (17)$$

Предполагаем, что параметр σ^2 в этом соотношении является решением следующей начальной задачи:

$$\frac{\partial\sigma^2}{\partial t} + u_x \frac{\partial\sigma^2}{\partial x} = 0 \qquad (18)$$

$\sigma^2 = \sigma_o^2$ при $t = 0, x = 0.$

Подставляя выражение (17) в соотношение (14), после несложных преобразований получаем следующее уравнение для функции Ω:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} u_x \Omega + \frac{\partial}{\partial z}(u_z - u_s)\Omega = \\ = -i \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} - \lambda \sigma^2 \Omega \right) - \frac{\lambda}{\tau} \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} . \qquad (19)$$

Предположим, что среднее поле скоростей примеси – соленоидально, т.е.

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 .$$

Считаем также, что среднее поле скоростей примеси обладает настолько слабой пространственной неоднородностью, что выполняются условия:

$$grad\ \mathbf{u} = const.$$

В этом случае горизонтальную и вертикальную составляющие средних скоростей примеси можно представить в виде:

$$u_x = ax + b_1 \quad u_z = -az + b_2,$$

где a, b_1, b_2 – произвольные константы.

Если параметры τ и σ не зависят от переменной z, то в этом случае для упрощения уравнения (19) можно использовать следующее функциональное преобразование:

$$\Omega(t, x, z, \lambda) = F(t, x, \varsigma), \qquad \varsigma = z + i\lambda K , \qquad (20)$$

где K – некоторая функция от t и x.

Это функциональное преобразование приводит уравнение (19) к известному уравнению турбулентной диффузии (в градиентном приближении), а именно:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + (ax + b_1)\frac{\partial F}{\partial x} + (-a\varsigma + b_2 - u_s)\frac{\partial F}{\partial \varsigma} = K\frac{\partial^2 F}{\partial \varsigma^2} . \qquad (21)$$

Как видим, соотношение (21) по внешнему виду ничем не отличается от известных полуэмпирических уравнений турбулентной диффузии (*К-теория*). Однако оно имеет место только в том случае, когда аналог коэффициента турбулентной диффузии K является решением следующего уравнения:

$$\frac{\partial K}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left(ax+b_1\right)K=-\frac{1}{\tau}K+\sigma^2 . \qquad (22)$$

Таким образом, при исследовании турбулентных диффузионных процессов можно действительно во многих случаях использовать градиентное приближение, если коэффициенту турбулентной диффузии придавать несколько иной физический смысл (к примеру, для стационарной турбулентности этот аналог коэффициента турбулентной диффузии может существенно зависеть от времени и т.д.). Насколько нам известно, этот вывод подтверждают результаты стохастического моделирования и материалы прецизионных эмпирических измерений в пограничном слое атмосферы.

Еще раз отметим, что приведенные преобразования формально решают «начальную» задачу для уравнения Фоккера-Планка (9), если выполняются условия:

- параметры τ и σ не зависят от той пространственной переменной, по которой «разыгрывается» диффузионный процесс;
- среднее поле скоростей среды - соленоидально и по линейному закону зависит от пространственных координат.

Непосредственная проверка показывает, что, к сожалению, эти условия являются не только достаточными, но и, возможно, *необходимыми*, чтобы можно было провести для уравнения Фоккера-Планка столь упрощающее анализ функциональное преобразование типа (20) путем перехода к введенной автомодельной переменной ς.

О нетрадиционной интерпретации К-теории

С помощью функционального преобразования (20) концентрация и турбулентный поток частиц газо-аэрозольной примеси могут быть представлены в виде:

$$n(t,x,z)=F(t,x,\varsigma)\Big|_{\varsigma=z}, \qquad j(t,x,z)=-K(t,x)\frac{\partial n}{\partial z}. \qquad (23)$$

Из этих соотношений следует очень важный вывод, что для рассмотренной модели турбулентной диффузии *градиентное приближение для потока является точным*, правда, коэффициент турбулентной диффузии теряет при этом свой традиционный физический смысл, приписываемый ему полуэмпирической *К-теорией*.

В неподвижной среде для невесомой примеси уравнения (18) и (22) принимают вид:

$$\sigma^2 = const, \qquad \frac{\partial K}{\partial t} = -\frac{1}{\tau}K + \sigma^2 . \tag{24}$$

Пусть τ $=const$. Тогда приведенное уравнение для K имеет следующее стационарное решение:

$$K \Rightarrow k = \sigma^2 \tau . \tag{25}$$

Это выражение в точности соответствует определению коэффициента турбулентной диффузии в полуэмпирической *К-теории,* где σ - среднеквадратическая скорость турбулентных молей, τ - характерное лагранжевое время их «жизни».

Если бы это стационарное решение можно было использовать, начиная с начального времени $t = 0$, то тем самым можно было бы считать доказанным, что даже при параметризации турбулентной диффузии уравнением Фоккера-Планка полуэмпирическая *К-теория* является точной. Однако в этом случае начальное распределение частиц примеси в фазовом пространстве надо было бы представить в виде:

$$\phi = n\left(z + i\lambda\sigma^2\tau\right)e^{-\lambda^2\sigma^2/2} ,$$

что с физической точки зрения совершенно не имеет смысла.

Наиболее естественным можно считать предположение, что при формировании облака газо-аэрозольной примеси в начальный момент времени пространственное распределение частиц и их распределения по скоростям являются статистически независимыми. А это будет иметь место только в том случае, когда для коэффициента диффузии выполняется следующее начальное условие:

$$K = 0 \text{ при } t = 0.$$

При этом начальном условии решение уравнения для K имеет вид:

$$K = k\left(1 - e^{-t/\tau}\right). \tag{26}$$

Выводы

При решении начальных задач для уравнений диффузии при определенных условиях можно действительно использовать градиентное приближение, однако коэффициент при градиенте средней концентрации нужно при этом считать функцией времени даже для стационарной и однородной турбулентности среды. Следует заметить, что на этот эффект впервые, видимо, обратили внимание еще Чанади и Дирдорф, правда, они исходили из несколько иных соображений.

* *

Для аналізу фізичних особливостей турбулентної дифузії газо-аерозольних домішок за межами відомого застосування напівемпіричної К-теорії пропонується параметризація процесу турбулентного перемішування на основі рівняння Фоккера-Планка. Отримано функціональне перетворення цього рівняння для початкових задач Коші, яке істотно полегшує проведення аналізу особливостей вертикальної турбулентної дифузії локальних утворень газо-аерозольних домішок у граничному шарі атмосфери, що утворюються, у тому числі, у результаті аварій на великих атомних, хімічних чи нафтопереробних підприємствах.

* *

1. Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей / Под ред. *Ф. Т. М. Ньюстадта, Х. Ван Допа*. – Л.: Гидрометеоиздат, 1985. - 351 с.
2. *Берлянд М.Е.* Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеоиздат, 1975. - 320 с.
3. *Колмогоров А.Н.* Об аналитических методах в теории вероятностей // Успехи математических наук. – 1938. - Вып. 5. - С. 5-41.
4. *Курбацкий А.Ф.* Моделирование нелокального турбулентного переноса импульса и тепла. - М.: Наука, 1988. - 240 с.
5. *Леви П.* Стохастические процессы и броуновское движение. - М.: Наука, 1972. - 375 с.
6. *Монин А.С. Яглом А.М.* Статистическая гидромеханика. В 2 т.- СПб: - Л: Гидрометеоиздат, 1992. - Т.1. - 693 с.
7. *Чандрасекар С*. Стохастические проблемы в физике и астрономии – М.: Изд-во иностр. лит., 1947. - 170 с.