© «Вестник ИГЭУ» Вып. 3 2006 г.

УДК 004.942::524.3-6

УЧЕТ ФАКТОРА ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ВОЗДУШНОЙ СРЕДЕ

ПЕКУНОВ В.В., канд. техн. наук

Рассматривается вопрос о включении фактора излучения в математическую модель, описывающую процессы образования и распространения загрязнений в воздушной среде. Приводятся базовые уравнения динамики загрязнений, уравнения переноса прямого солнечного и диффузного (солнечного и теплового инфракрасного) излучения. Даны выражения для вычисления оптических характеристик среды, содержащей капельную фазу.

Ключевые слова: загрязнение в воздушной среде, математическая модель, солнечное и тепловое излучение.

RADIATION FACTOR ACCOUNTING IN SIMULATING THE PROCESS OFAIR POLLUTION FORMING AND SPREADING

V.V. PEKUNOV, Ph.D.

This work is devoted to the problem of radiation factor inclusion into mathematical model, which describes the processes of air pollution forming and spreading. The author gives base equations of pollution dynamics, the equations of direct solar and diffuse (solar and heat infrared) radiation. Formulas for calculating visual characteristics of the environment, containing spot phase, are also given here.

Key words: air pollution, mathematical model, solar and heat radiation.

Моделирование процессов образования и распространения загрязнений требует учета множества факторов, среди которых необходимо особо выделить излучение. Прежде всего излучение влияет на процессы образования вторичных загрязнений в результате фотохимических реакций, что характерно, например, для сухого лос-анджелесского смога. Кроме того, излучение оказывает существенное воздействие на процессы теплообмена, которые, в свою очередь, влияют как на образование, так и на распространение загрязнений. Однако в известных автору математических моделях распространения загрязнений излучение либо просто не принимается во внимание, либо учитывается со значительными упрощениями (например, интенсивность излучения считается постоянной и не учитывается сложная форма расчетной области). Поэтому актуальна задача разработки такой модели образования и распространения загрязнений, которая в достаточно полной мере учитывала бы фактор излучения.

Сформулируем фрагмент трехмерной модели, включающий базовые уравнения переноса и образования загрязнителей, уравнения переноса прямого солнечного и диффузного излучения, а также соотношения для расчета оптических характеристик среды при наличии в ней капельной фазы.

В расчетной области введем прямоугольные координаты (x_1, x_2, x_3) таким образом, чтобы ось Ox_3 была вертикальной. Воспользуемся моделью течения несжимаемой вязкой жидкости в системе «вектор вихря – векторный потенциал», которая обладает высокой стабильностью в расчетах. Уравнения для трех компонентов вектора вихря ω запишем с использованием эффективной вязкости $\nu_{эфф} = \nu_{мол} + \nu_т$, где $\nu_{мол}$ – молекулярная вязкость, а $\nu_т$ – турбулентная вязкость:

$$\frac{\partial \omega_j}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} U_i \frac{\partial \omega_j}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\nu_{эфф}\frac{\partial \omega_j}{\partial x_i}\right) + \sum_{i=1}^{3} \omega_i \frac{\partial U_j}{\partial x_i} + F_j; \; j = 1, 2, 3;$$

$$F_1 = \beta g \frac{\partial T}{\partial x_2}; \quad F_2 = -\beta g \frac{\partial T}{\partial x_1}; \quad F_3 = 0,$$

где β – термический коэффициент расширения воздуха; g = 9,81 м/с^2.

Для расчета турбулентной вязкости может быть применена любая адекватная модель турбулентности, например, были успешно испытаны модели K-E и Абрамовича-Секундова.

Вектор вихря равен ротору скорости U:

$$\omega_1 = \frac{\partial U_3}{\partial x_2} - \frac{\partial U_2}{\partial x_3}; \quad \omega_2 = \frac{\partial U_1}{\partial x_3} - \frac{\partial U_3}{\partial x_1}; \quad \omega_3 = \frac{\partial U_2}{\partial x_1} - \frac{\partial U_1}{\partial x_2}.$$

Вектор скорости равен ротору векторного потенциала ψ:

$$U_1 = \frac{\partial \psi_3}{\partial x_2} - \frac{\partial \psi_2}{\partial x_3}; \quad U_2 = \frac{\partial \psi_1}{\partial x_3} - \frac{\partial \psi_3}{\partial x_1}; \quad U_3 = \frac{\partial \psi_2}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi_1}{\partial x_2},$$

Для векторного потенциала запишем три уравнения Пуассона:

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2 \psi_j}{\partial x_i^2} = -\omega_j; \; j = 1, 2, 3.$$

При этом граничные условия ставятся согласно [2].

Уравнение для температуры среды T имеет вид:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} U_i \frac{\partial T}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\left(D_T + \alpha_T \nu_m\right)\frac{\partial T}{\partial x_i}\right) + \frac{W_l}{c\rho},$$

где D_T – коэффициент температуропроводности; α_T – вспомогательный коэффициент; W_l – приток энергии излучения; ρ и c – плотность и теплоемкость воздуха.

Особо следует сказать о *граничных условиях для температуры на стенках*. Фактически, в верхнем слое любой стенки, перпендикулярной некоторой оси x_j, решается двумерное уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = a_s^2 \sum_{i \neq j} \frac{\partial^2 T_s}{\partial x_i^2} + \frac{W_s + \xi_s\left(T - T_s\right)}{c_s \rho_s},$$

где T_s – температура стенки; a_s^2, c_s, ρ_s – температуропроводность, теплоемкость и плотность материала стенки соответственно; ξ_s – коэффициент, Вт·м$^{-3}$·К$^{-1}$, характеризующий теплопередачу на границе стенки и окружающей среды; W_s – член, выражающий обмен лучистой энергией с окружающей средой. Выражения для W_l и W_s приведены ниже.

Уравнения диффузии веществ с концентрациями C имеют следующий вид:

$$\frac{\partial C_j}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3}U_i^j\frac{\partial C_j}{\partial x_i}=\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\left(D_{C_j}+\alpha_{C_j}\nu_m\right)\frac{\partial C_j}{\partial x_i}\right)-$$

$$-\Delta C_j+\frac{dC_j}{dt};\ j=\overline{1,N},$$

где $U_1^j = U_1$, $U_2^j = U_2$, $U_3^j = U_3 + W_j$; W_j – скорость витания j-го вещества; D_{C_j} – коэффициент диффузии j-го вещества; α_{C_j} – вспомогательный коэффициент для j-го вещества; N – число веществ; член ΔC_j выражает изменение концентрации j-го вещества при взаимодействии с водяными каплями; $\frac{dC_j}{dt}$ выражает изменение концентрации в результате химических реакций.

Для *фотохимических реакций* может быть определен *стартовый порог интенсивности излучения*. В этом случае реакция начнется лишь тогда, когда уровень солнечного излучения достигнет этого порога. При этом можно ограничиться двумя диапазонами излучения: солнечным видимым (длины волн 0,4–0,75 мкм) и солнечным инфракрасным (0,75–4 мкм), выделив в каждом диапазоне две составляющие: прямое и диффузное (отраженное и рассеянное) излучение. Для корректного рассмотрения тепловых процессов необходимо также принять во внимание тепловое инфракрасное (4–100 мкм) излучение, которое будем считать диффузным.

Интегральная освещенность F_0, Вт·м$^{-2}$, создаваемая *прямым солнечным излучением* в точке (x,y,z), рассчитывается по следующей формуле:

$$F_0(x,y,z)=F_\Theta\cdot e^{-l(x,y,z)},$$

где F_Θ – освещенность, создаваемая солнечным излучением на границе расчетной области; $l(x,y,z)$ – безразмерная оптическая толщина среды *в направлении падающего солнечного луча*, определяемая интегрированием по отрезку L (от точки вхождения луча в расчетную область до точки (x,y,z)):

$$l(x,y,z)=\int_L\beta_e(s)\,ds,$$

причем имеют место соотношения:

$$\alpha_t(s)=\beta_e(x,y,z)\cdot\left(1-\varpi(x,y,z)\right);$$

$$\beta_s(x,y,z)=\varpi(x,y,z)\cdot\beta_e(x,y,z),$$

здесь β_e, β_s, α_t – коэффициенты, м$^{-1}$, ослабления (экстинкции), рассеивания и поглощения соответственно; ϖ – альбедо однократного рассеивания.

Для расчета оптической толщины среды в направлении падающего луча используется упрощенный вариант обратной трассировки луча (метода, широко применяемого в машинной графике). Из каждой ячейки (X,Y,Z) расчетной сетки в направлении, обратном направлению падения солнечного луча (Ω_0), «выпускается» N_b лучей и отслеживаются ячейки, через которые они пройдут. Для каждого i-го луча вычисляется оптическая толщина

$$l_i(X,Y,Z)=\begin{cases}\infty, & \text{если луч попал в стенку;}\\ \sum\limits_{P_i(X,Y,Z)}\beta_e(k,m,n)\cdot t_i(k,m,n), & \text{иначе,}\end{cases}$$

где $P_i(X,Y,Z)$ – множество ячеек, через которые прошел i-й луч; $t_i(k,m,n)$ – длина отрезка луча, ограниченного ячейкой (k,m,n).

Тогда

$$e^{-l(X,Y,Z)}=\frac{1}{N_b}\sum_{i=1}^{N_b}e^{-l_i(X,Y,Z)}.$$

В рамках диффузионного приближения [1], используя метод сферических гармоник (P1-приближение), *интегральную диффузную интенсивность излучения* I, Вт·м$^{-2}$·ср$^{-1}$, в направлении $\overline{\Omega}$ для любого диапазона можно определить [3, 5] выражением

$$I\left(x,y,z,\overline{\Omega}\right)=I_0^0-\frac{1}{\beta_t}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i}\Omega_{x_i};\qquad(1)$$

где $\beta_t=\beta_e\left(1-\varpi g_a\right)$; g_a – фактор асимметрии.

Коэффициенты g_a, ϖ и β_e вычисляются *для каждого диапазона излучения по отдельности* с учетом наличия в среде капель воды, причем

$$\beta_e=\beta_{e0}+\beta_{ed},$$

где $\beta_{e0}=\beta_{e0}(z)$ – собственный коэффициент ослабления воздуха на заданной высоте z; β_{ed} – коэффициент ослабления за счет наличия дисперсной (капельной) фазы.

Выражения для β_{ed}, ϖ и g_a будут приведены далее.

Первый компонент I_0^0 разложения *интегральной диффузной интенсивности излучения* определяется решением следующего уравнения Пуассона для анизотропной среды [3, 5]:

$$\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{1}{\beta_t}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i}\right)=$$

$$=3\alpha_t I_0^0-\begin{cases}\dfrac{3\beta_s F_0}{4\pi}, & \text{для солнечного излучения,}\\ 3\alpha_t\cdot f_T(T), & \text{для инфракрасного;}\end{cases}$$

$$f_T(T)=\int_{\lambda_1}^{\lambda_2}B(T)\,d\lambda,$$

где $B(T)$ – функция Планка.

При типичных расчетах экологии воздушной среды (в диапазоне температур 243–423 К при длинах волн 4–100 мкм) можно упростить вычисления, интерполировав интеграл функции Планка кубическим полиномом:

$$f_T(T)\approx 1{,}86\cdot10^{-5}\cdot T^3-6{,}932\cdot10^{-3}\cdot T^2+$$

$$+1{,}136\cdot T-69{,}041.$$

Потоки диффузной освещенности (для любого диапазона) в прямом (+) и обратном (-) направлениях координатных осей задаются соотношением

$$F_{\pm x_i}=\int_{2\pi}I\left(x,y,z;\overline{\Omega}\right)\Omega_{x_i}\,d\Omega=\pi I_0^0\mp\frac{2}{3}\pi\frac{1}{\beta_t}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i},$$

а компоненты *вектора* $\overline{F_d}$ *потока диффузной освещенности* –

$$\left(\overline{F_d}\right)_i = F_{+x_i} - F_{-x_i} = -\frac{4}{3}\pi\frac{1}{\beta_t}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i}.$$

Граничные условия (в любом диапазоне) для уравнения диффузной интенсивности излучения на *открытых границах* задаются из условия равенства диффузного потока извне некоторой известной величине F_{ext}:

$$F_{+x_i}(x_i = 0) = \pi I_0^0 - \frac{2}{3}\pi\frac{1}{\beta_t}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i} = F_{ext};$$

$$F_{-x_i}(x_i = a) = \pi I_0^0 + \frac{2}{3}\pi\frac{1}{\beta_t}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i} = F_{ext}.$$

На *закрытых границах (стенках) для солнечного излучения* задается условие равенства выходящего диффузного потока F_{out} полному (включающему прямую солнечную радиацию) входящему потоку освещенности F_{in}, умноженному на альбедо стенки ω_s. Пусть $\overline{n} = (n_1; n_2; n_3)$ – вектор внешней нормали стенки. В зависимости от направления нормали

$$F_{\pm x_i}\begin{Bmatrix} n_i > 0 \\ n_i < 0 \end{Bmatrix} = \pi I_0^0 \mp \frac{2}{3}\pi\frac{1}{\beta_t}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i} =$$

$$= \omega_s\left(\pi I_0^0 \pm \frac{2}{3}\pi\frac{1}{\beta_t}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i} \mp F_0 \cdot (\Omega_0)_{x_i}\right),$$

тогда

$$\left[I_0^0 \mp \frac{2(1+\omega_s)}{3(1-\omega_s)}\frac{1}{\beta_t}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i}\right]_{\begin{Bmatrix} n_i > 0 \\ n_i < 0 \end{Bmatrix}} = \mp\omega_s\frac{(\Omega_0)_{x_i} \cdot F_0}{\pi(1-\omega_s)},$$

где Ω_0 – вектор падения прямых солнечных лучей.

На *закрытых границах (стенках) для теплового инфракрасного излучения* в зависимости от направления нормали

$$F_{\pm x_i}\begin{Bmatrix} n_i > 0 \\ n_i < 0 \end{Bmatrix} = \pi I_0^{0,IR} \mp \frac{2}{3}\pi\frac{1}{\beta_t^{IR}}\frac{\partial I_0^{0,IR}}{\partial x_i} =$$

$$= (1-\varepsilon_s)\left(\pi I_0^{0,IR} \pm \frac{2}{3}\pi\frac{1}{\beta_t^{IR}}\frac{\partial I_0^{0,IR}}{\partial x_i}\right) + \varepsilon_s f_T(T)$$

тогда

$$\left[I_0^{0,IR} \mp \frac{2(2-\varepsilon_s)}{3\varepsilon_s}\frac{1}{\beta_t^{IR}}\frac{\partial I_0^{0,IR}}{\partial x_i}\right]_{\begin{Bmatrix} n_i > 0 \\ n_i < 0 \end{Bmatrix}} = \frac{f_T(T)}{\pi},$$

где ε – коэффициент черноты поверхности стенки; верхний индекс IR относит величины к диапазону теплового инфракрасного излучения.

Подставив выражения (1) в формулу для вектора потока диффузной освещенности, с учетом вышеуказанного уравнения Пуассона, а также с учетом теплового инфракрасного излучения получим соотношение для локального объемного потока энергии W_l, Вт·м$^{-3}$, поступающей в среду при поглощении диффузного и прямого солнечного излучения:

$$W_l = -div\left(\sum\overline{F_d} + \sum\overline{F_{sol}} + \overline{F_d^{IR}}\right) =$$

$$= \sum\left(4\pi\alpha_t I_0^0 + \alpha_t F_0\right) + 4\pi\alpha_t^{IR}\left(\cdot I_0^{0,IR} - f_T(T)\right),$$

где $\overline{F_{sol}}$ – вектор потока прямой солнечной освещенности в заданном диапазоне, причем $div\left(\overline{F_{sol}}\right) = -\beta_e F_0$. Суммы берутся по диапазонам *солнечного* излучения.

Локальный объемный поток энергии излучения W_s, Вт·м$^{-3}$, для элемента стенки с внешней нормалью $\overline{n} = (n_1; n_2; n_3)$ описывается соотношением

$$W_s\begin{Bmatrix} n_i > 0 \\ n_i < 0 \end{Bmatrix} = \varepsilon_s\left(\pi I_0^{0,IR} \pm \frac{2}{3}\pi\frac{1}{\beta_t^{IR}}\frac{\partial I_0^{0,IR}}{\partial x_i}\right) - \varepsilon_s f_T(T) +$$

$$+ (1-\omega_s)\sum\left[\pi I_0^0 \pm \frac{2}{3}\pi\frac{1}{\beta_t}\frac{\partial I_0^0}{\partial x_i} \mp F_0(\Omega_0)_{x_i}\right].$$

Рассмотрим оптические характеристики среды, содержащей капельную фазу. Пусть имеется Z компонентов фазы, причем каждому i-му компоненту соответствуют капли с диаметрами от x_i до y_i и известна функция распределения капель по диаметрам $n_i(d)$.

Фактор асимметрии g_a и альбедо однократного рассеивания среды ϖ определим формулами:

$$g_a = \frac{\beta_{e0}\varpi_0 g_0 + \sum_{i=1}^{Z}\beta_{ei}\varpi_i g_i}{\beta_{e0}\varpi_0 + \sum_{i=1}^{Z}\beta_{ei}\varpi_i}; \qquad \varpi = \frac{\beta_{e0}\varpi_0 + \sum_{i=1}^{Z}\beta_{ei}\varpi_i}{\beta_{e0} + \beta_{ed}};$$

$$\beta_{ed} = \sum_{i=1}^{Z}\beta_{ei},$$

где ϖ_0 и g_0 – усредненные (по диапазону излучения) альбедо однократного рассеивания и фактор асимметрии незамутненного воздуха; ϖ_i, g_i, β_{ei} – альбедо однократного рассеивания, фактор асимметрии и коэффициент ослабления i-го компонента. Наиболее точно оптические параметры компонентов капельных фаз могут быть рассчитаны по теории Ми, но для прямых оперативных расчетов эта теория малопригодна ввиду ее высокой вычислительной трудоемкости. Существует более простая (но менее точная) теория аномальной дифракции, но при необходимости осреднения оптических параметров по диапазону длин волн (численного нахождения интегралов от таблично заданного комплексного показателя преломления [6]) расчет также будет весьма трудоемким. Поэтому целесообразно применить соотношения, приближающие результаты точных вычислений по теории Ми. Применим интерполяцию непосредственно по диаметру капель, избегая вычисления эффективного диаметра капель компонента (то есть дополнительного осреднения, примененного, например, в [4]).

Определим:

$$\varpi_i = \frac{\beta_{ei} - \beta_{ai}}{\beta_{ei}}; \quad g_i = \frac{\int_{x_i}^{y_i} n(D) \cdot G_i(D)\,dD}{N_k^i};$$

$$\beta_{ei} = \frac{\pi}{4}\int_{x_i}^{y_i} n(D) \cdot Q_{ei}(D) \cdot D^2 dD;$$

$$\beta_{ai} = \frac{\pi}{4}\int_{x_i}^{y_i} n(D) \cdot Q_{ai}(D) \cdot D^2 dD,$$

где G_i, Q_{ei} и Q_{ai} – усредненные (по диапазону излучения) безразмерные коэффициенты асимметрии, ослабления и поглощения одной капли i-го компонента; β_{ai} – коэффициент поглощения i-го компонента. Функции $G_i(D)$, $Q_{ei}(D)$ и Q_{ai}(D) являются результатом *полиномиальной интерполяции* по методу наименьших квадратов. Исходные точки для интерполяции определяются функциями:

$$\tilde{Q}_{ei}(D) = \frac{1}{P}\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \tilde{y}(\lambda)\cdot q_e(\lambda, D)\,d\lambda\ ;$$

$$\tilde{Q}_{ai}(D) = \frac{1}{P}\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \tilde{y}(\lambda)\cdot q_a(\lambda, D)\,d\lambda\ ;$$

$$\tilde{G}_{i}(D) = \frac{1}{P}\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \tilde{y}(\lambda)\cdot g_m(\lambda, D)\,d\lambda\ ;$$

$$P = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \tilde{y}(\lambda)\,d\lambda\ ,$$

где λ_1 и λ_2 – начальная и конечная длины волн рассчитываемого диапазона излучения; $\tilde{y}(\lambda)$ – нормированная функция Планка для солнечного излучения; q_e, q_a, g_m – коэффициенты для одной капли, рассчитанные по теории Ми.

Таким образом, предложенный фрагмент математической модели образования и распространения загрязнений с учетом воздействия солнечного и теплового инфракрасного излучений позволяет принять в расчет лучистый теплообмен и более корректно учитывать фотохимические реакции, что особенно важно при моделировании вторичного загрязнения.

Список литературы

1. **Алексеев Б.В., Гришин А.М.** Физическая газодинамика реагирующих сред. – М.: Высш. шк., 1985.

2. **Роуч П.** Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир, 1980.

3. **Chen Y., Liou K.N., Gu Y.** An efficient diffusion approximation for 3D radiative transfer parameterization: application to cloudy atmospheres // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2005. – № 92. – P.189–200.

4. **Hu Y.** A Study of the Link between Cloud Microphysics and Climate Change: PhD Thesis. – University of Alaska, Fairbanks, 1994.

5. **Ou S.C., Liou K.N.** Numerical experiments on the Helmholtz equation derived from the solar radiation transfer equation in three-dimensional space // Appl. Math. Comput. – 1980. – № 6. – P. 155–175.

6. **Segelstein, D.J.** The complex refractive index of water: M.S.Thesis. – University of Missouri, Kansas City, 1981.

Пекунов Владимир Викторович,
ГОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
кандидат технических наук, доцент кафедры высокопроизводительных вычислительных систем,
телефон (4932) 26-98-29.