

流体中污染物扩散的分形模拟

瞿波¹, 保尔·爱迪生²

(1. 南通大学理学院, 江苏 南通 226007 ; 2. 英国卡迪欧数值公司, 苏格兰 爱丁堡 EH33 1EH)

摘要 :为了模拟流体中污染物的传播 , 用分数布朗运动(fBm)产生非费克(non-Fickian)的扩散。提出用 fBm 粒子追踪模型通过粒子云来模拟污染物传播的具体方法 , 实例比较了传统的布朗粒子追踪模型和 fBm 粒子追踪模型。结果表明 , fBm 粒子追踪模型粒子云的传播速度和范围有明显的增加 ; Hurst 指数的变化可改变一个流动区域受污染物影响的程度 , 而这种现象是不能靠常规的布朗运动来实现的 , fBm 粒子追踪法适用于沿海地区污染物传播的模拟。

关键词 :布朗运动 ; 分数布朗运动 ; 粒子追踪 ; 分形 ; 费克扩散

中图分类号 : O351.2 **文献标识码 :** A **文章编号 :** 1006-7647(2009)06-0009-04

Simulation of fractal pollutant dispersion in fluids // QU Bo¹, ADDISON Paul S² (1. School of Science , Nantong University , Nantong 226007 , China ; 2. CardioDigital Ltd. , Elvingston Science Centre , Edinburgh , EH33 1EH , United Kingdom)

Abstract : In order to represent pollutant dispersion in fluids , fractional Brownian motion(FBM) was used to simulate non-Fickian diffusion. The FBM particle tracing model was proposed to simulate the pollutant dispersion using particle clouds. The traditional Brownian particle-tracking model and the FBM particle tracking model were compared through a practical example. The results show that the spreading speed and scale of particle clouds are significantly greater in the FBM particle tracing model. A change of the Hurst exponent can change the degree of the effects of contamination on a flow area , but this phenomenon cannot be realized through traditional Brownian motion. The FBM particle tracking model is suitable for simulating pollutant dispersion in coastal areas.

Key words : Brownian motion ; fractional Brownian motion(FBM) ; particle tracking ; fractal ; Fickian diffusion

污染扩散是水利研究和环境研究的重要领域 , 所以有必要准确地预测流体中污染物的扩散。要做到这一点 , 需要一种准确模拟流体扩散的方法。传统的方法通常是用对流扩散方程或粒子追踪^[1] , 但这 2 种方法都不能给出满意的结果。因为传统方法粒子之间距离的方差与时间成正比 , 而实际上 , 例如在大海里和沿海区域 , 当空间很大时 , 很少有符合这种假定的情况^[2]。最近研究^[3-4]表明 , 在很大的活动范围内 , 已经能用分数布朗运动(fractional Brownian motion , 简称 fBm)描述海面漂浮物的轨迹特征 , 因此 , 可采用 fBm 来模拟海面污染物扩散 , 为此 , 笔者构建了 fBm 粒子追踪模型。

粒子追踪模型可以用来提供有价值的信息以协助问题的分析或工程设计 , 由于对模型的物理过程了解仍然有限 , 这一模型仍有待进一步改善。迄今为止 , 大多数粒子追踪模型采用随机布朗运动来描述湍流的扩散 , 这种模型假设粒子轨迹是间断性连续的 , 即粒子的运动轨迹遵循一个简单的随机散步

规律 , 表现出朝随机方向一步一步地移动的趋势。然而 , 观察资料明显地表明 , 粒子运动是连续的 , 粒子的拉格朗日记忆对预测下一步移动的方向起着重要的作用^[5]。模拟连续的运动 , 必须要用新兴的分形统计方法。

本文简要介绍传统的粒子追踪模型 , 讨论 fBm 的生成及其所具有的分形和扩散的特性 , 并比较传统的粒子追踪模型和 fBm 粒子追踪模型的模拟结果。

1 传统的随机散步模型

传统的随机散步模型模拟的是大量粒子向空间各个方向随机扩散的过程。这个扩散是和主流的对流联系在一起的 , 是由主流的速度场决定的。传统模型的随机步骤通常采用高斯概率分布(即布朗运动) 来定义。但传统的随机散步技术有一个根本的缺陷 , 即它只产生费克(Fickian)发散 , 因此 , 如果大量的粒子用于粒子追踪模型 , 则粒子云的方差 σ_c^2 与

作者简介 : 瞿波(1962—) , 女 , 江苏南通人 , 讲师 , 博士 , 从事分形水利模型研究。E-mail : qubo62@gmail.com

扩散时间成正比,即

$$\sigma_c^2 = 2Dt \tag{1}$$

式中: D 为扩散系数,它取决于流体的温度、黏度和粒子的大小。因此,在每个空间方向上离散的布朗运动 $B(t_i)$,可以在离散时间 $t_i = i\Delta t$ 中产生(i 为整数 Δt 为时间间隔)即把高斯分布中一系列的随机步骤 $W(t_i)$ 相加:

$$B(t_i) = \sum_{j=1}^i W(t_j) \tag{2}$$

$W(t_i)$ 也叫高斯白噪声。

随机粒子移动步骤 $W(t_i)$ 的方差 σ_p^2 为

$$\sigma_p^2 = 2D\Delta t \tag{3}$$

因此 N 步后扩散结果的标准偏差可由式(4)简单地给出:

$$\sigma_c = \sigma_p N^{\frac{1}{2}} \tag{4}$$

式中: N 为随机散步的步数; σ_c 为 N 步时的粒子云的标准差; σ_p 为单步粒子云的标准差。

2 分数布朗运动模型

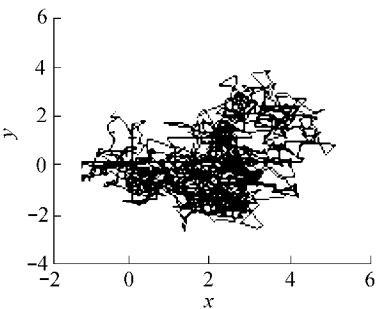
和布朗运动一样,fBm也是高斯白噪声相加产生的,其定义为

$$B_H(t) = \frac{1}{\Gamma(H + \frac{1}{2})} \int_{-\infty}^t (t-s)^{H-\frac{1}{2}} dB(s) \tag{5}$$

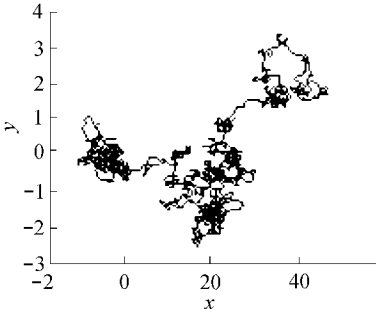
式中: $B_H(t)$ 为时间 t 时的 fBm; $B(s)$ 是一个高斯随机过程; H 为 Hurst 指数。式(5)中分数型无穷下限的积分实际上是不实用的,因为为了在时间 t 时逼近 fBm 而需要从负无穷开始积分。上述定义的另一问题是当 s 趋于 $-\infty$ 时是发散的。要用这个模型有必要定义一个从原点开始的 fBm,即在 $t=0$ 时, $B_H(t)=0$ 。这可以用原定义式(5)减去在时间 $t=0$ 时的 fBm 来得到,即

$$B_H(t) - B_H(0) = \frac{1}{\Gamma(H + \frac{1}{2})} \cdot$$

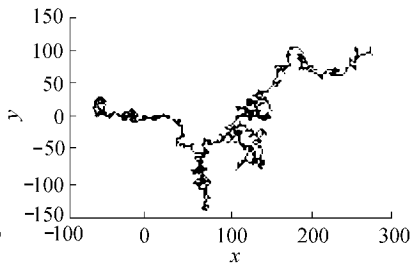
$$\left\{ \int_{-\infty}^0 [(t-s)^{H-\frac{1}{2}} - (-t)^{H-\frac{1}{2}}] dB(s) - \right.$$



(a) 反持续的 ($H=0.2$)



(b) 间断性的 ($H=0.5$)



(c) 持续的 ($H=0.8$)

图1 二维的 fBm($M=1000$)

$$\left. \int_0^t (t-s)^{H-\frac{1}{2}} dB(s) \right\} \tag{6}$$

但仍必须从负无穷开始积分来准确定义 fBm,这个问题可以这样解决:用有限的记忆导出一个离散的 fBm 近似表达式,即在式(6)的基础上定义^[6]:

$$B_H(t_i) = \frac{1}{\Gamma(H + \frac{1}{2})} \left\{ \sum_{j=i-M}^0 [(i-j)^{H-\frac{1}{2}} - (-j)^{H-\frac{1}{2}}] R(t_j) + \sum_{j=1}^i (i-j)^{H-\frac{1}{2}} R(t_j) \right\} \tag{7}$$

在 Mandelbrot 等^[7]最初对 fBm 定义的基础上,笔者提出了一个更精确的 fBm 模型^[8-9],这个模型定义为

$$B_H(i) - B_H(i-1) = \frac{1}{\Gamma(H + \frac{1}{2})} \cdot \left\{ \sum_{j=i-m}^{i-2} [(i-j)^{H-\frac{1}{2}} - (i-j-1)^{H-\frac{1}{2}}] \cdot R(j) + R(i-1) \right\} \tag{8}$$

$$B_H(t_i) - B_H(0) = \sum_{i=1}^{t_i} [B_H(i) - B_H(i-1)] \tag{9}$$

式中: $B_H(t_i)$ 为在时间 t_i 处第 i 次离散地逼近 fBm; Δt 为单位时间间隔; M 为用于 fBm 近似值的有限记忆; $R(i)$ 为取样于高斯概率离散分布的随机步骤。方程(8)和(9)构成了两步的 fBm 模型。

不同于布朗运动模型,使用 fBm 模型,计算量将明显地增大,因为 fBm 模型中的每一步都要和前面的 M 步相加,Hurst 指数 H 满足 $0 < H < 1$ 。当 $H=0.5$ 时,式(8)(9)就简化成式(2)(常规布朗运动)。Hurst 指数的取值不同,式(8)(9)得到的轨迹可能是反持续的($H < 0.5$)、间断性的($H=0.5$)或持续的($H > 0.5$)。图1描述了平面上这3种不同类型的轨迹。下面集中考虑持续的 fBm,它产生非费克的类似于在湍流中的超扩散特性。

Osborn 等^[3-4]通过研究发现,卫星追踪海洋表

面漂浮物的轨迹可以由持续的 fBm 来描述。把全球分成东北大西洋和 Kurisho 海两大区域分别进行研究,发现 Hurst 指数总是在 0.79 ± 0.07 的范围内。此外,Hurst 指数和分形维数 D_δ 都可以描述 fBm。分形维数可以更自然地描述 fBm,即它在所有比例上都具有自相似的特征。分形维数表明了 fBm 轨迹充满它所在空间能力的大小,它和 Hurst 指数有关系,即

$$D_\delta = \min\left(\frac{1}{H} 2\right) \quad (10)$$

平面中的持续布朗运动更趋向于散开而不是充满整个平面(见图 1(c))。分形维数满足 $1 < D_\delta < 2$,即分形维数比相应的欧几里德空间的维数小。

fBm 粒子扩散云的标准差正比于时间的 Hurst 指数幂,即满足

$$\sigma_c = (2Dt)^H \quad (11)$$

Okubo^[10]对大量数据的研究发现,在北海扩散系数在 $0.05 \sim 220 \text{ m}^2/\text{s}$ 之间;Fisher^[11]对实验室水道测试和实际溪流及运河水流的研究发现,扩散系数在 $0.123 \sim 1500 \text{ m}^2/\text{s}$ 的范围内,并特别指出,在河流和沿海水域中,扩散系数一般在 $0.06 \sim 0.15 \text{ m}^2/\text{s}$ 之间。要定义分形扩散需要扩散系数和比例指数,常规布朗运动中的指数是 $\frac{1}{2}$,而在 fBm 中被更普遍的 Hurst 指数 H 取代 $0 < H < 1$ 。 H 的取值是根据粒子云发散的程度 σ_c 由公式(11)所决定的。一般地说, H 的取值越小,粒子云发散的程度就越小。注意到 $H = 0.8$ 的扩散程度远远超过 $H = 0.5$ 。典型的海洋浮标轨迹的 H 值在 $0.71 \sim 0.86$ 之间^[9]。

3 沿海表面的扩散模拟

沿海或海洋中污染物的扩散主要包含 2 种运动:对流和扩散。一般用粒子云来代表一群污染物。假设粒子云在时刻 $t = 0$ 时从平面内一点释放,粒子云就以对流和扩散两种形式结合起来同时做运动,粒子在 i 时的位移为此时间段上对流部分加上扩散部分,也就是 fBm 增量:

$$\Delta x(i) = U(i)\Delta t + \Delta B_x(i) \quad (12)$$

$$\Delta y(i) = V(i)\Delta t + \Delta B_y(i) \quad (13)$$

在 x 及 y 方向上每一步的扩散位移为 $\Delta B_x(i)$ 及 $\Delta B_y(i)$,也就是由式(8)(9)定义的 2 个独立的 fBm 增量。当碰到边界物时会产生反射,整个 fBm 轨迹的正负号也必须因反射而改变。这样就不会破坏 fBm 的连续性,因而记忆不会由此中断。因此,式(8)(9)(12)(13)就构成 fBm 粒子追踪模型。

采用一个理想化(也就是人为构造的具有规则

地理分布,且具有固定主流速)的沿海海湾,如图 2 所示。图 2(a)是海湾的均匀网格(每网格大小为 $100 \text{ m} \times 100 \text{ m}$),主流从北向南,流速是 0.5 m/s 。图 2(b)是放大后的海湾表面流速图。fBm 粒子追踪模型只包括主流、对流和由 fBm 模型形成的湍流,不计潮汐和其他因素引起的扩散。为简单起见,在 2 个空间方向上,Hurst 指数都取 0.75 。水流从西面的深水区分向东面的狭窄海湾流动,从左到右的深度分布是:从主要区域开始的 500 m 宽,其深度均是 50 m ,到靠近东海岸线的地方只有 10 m 深。

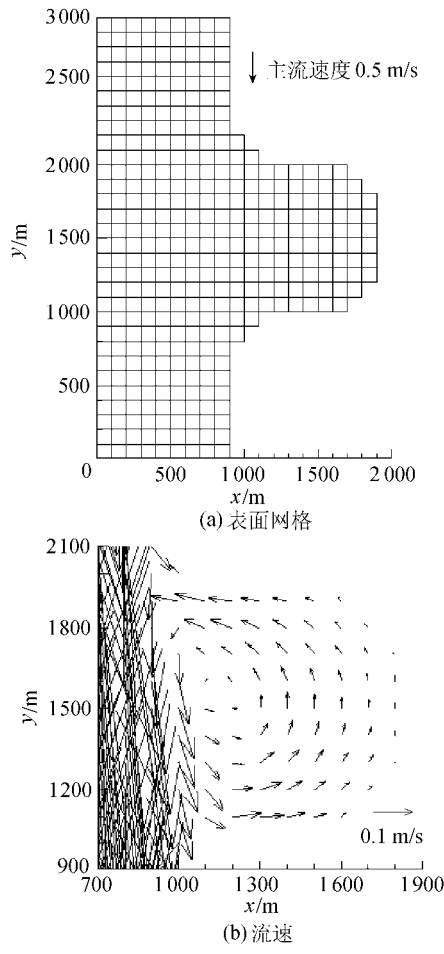


图 2 理想海湾的表面网格和流速

表面速度分布可以从一个分层的二维水动力学模型获得。模型选择 (a)在海湾上游释放,用常规布朗运动粒子追踪模型 (b)在海湾上游同一地点释放,用 Hurst 指数是 0.75 的持续性 fBm 粒子追踪模型。设定 2 个方向的扩散系数 $D = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$,由于分数布朗运动技术的计算强度,在每个测试案例中只释放 400 个粒子(通常数值模拟中要用到大约 10000 以上的大量的粒子,但少数粒子也足以说明问题)。粒子从网格中穿过,以平均对流速度对流(平均速度由小格交点处的 4 个速度矢量的双线性插值得到)按照式(2)或式(8)(9)中的随机步骤扩散。图 3 和图 4 显示了测试的结果。

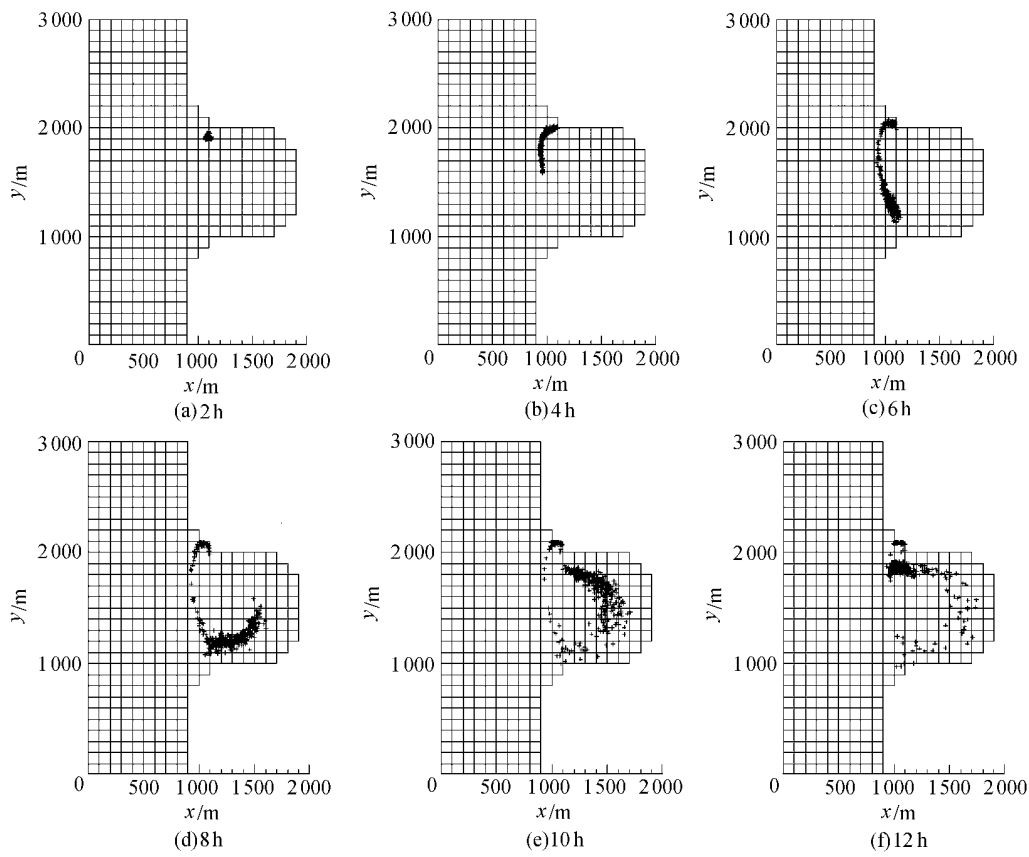


图3 传统布朗分布($H = 0.5$)的粒子云扩散

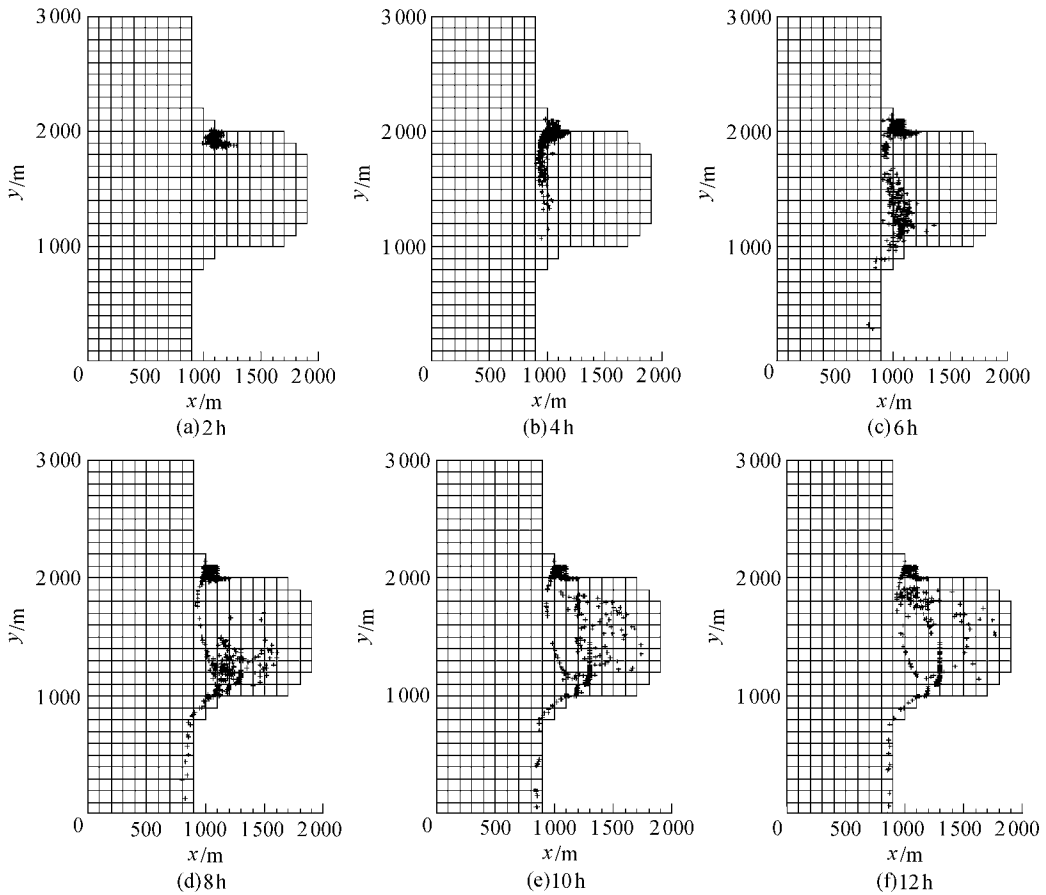


图4 fBm($H = 0.75$)的粒子云扩散

(下转第 28 页)

[8] SOULSBY R L , DYER K R. The form of the near-bed velocity profile in a tidally accelerating flow [J]. J of Geophysical Research ,1981 , 86(9) 8067-8074.

[9] 王家生 , 朱代臣 , 孙贵洲 , 等. 不同断面形态河槽阻力特性试验 [J]. 水利水电科技进展 , 2008 , 28(5) :13-15.

[10] 莱赫特曼. 大气边界层物理学 [M]. 淮培民 , 译. 北京 : 科学出版社 , 1982 :143.

[11] U. S. Army Coastal Engineering Research Center. Shore protection manual[M]. Washington , D. C. :World Scientific Publishing Co. ,1984 :134-137.

[12] NIKURADSE J. Laws of flow in rough pipes[M]. Washington , D. C. :NACA Tech. Mem ,1937 :1292.

[13] 肖洋 , 唐洪武 , 毛野 , 等. 新型声学多普勒流速仪及其应用 [J]. 河海大学学报 : 自然科学版 , 2002 , 30(3) :15-18.

[14] 黄才安 , 奚斌. 泥沙颗粒起动时明渠阻力方程 [J]. 河海大学学报 : 自然科学版 , 2000 , 28(5) :98-100.

[15] 卞华 , 李福田 , 蒋慧敏. 二维粗糙明渠的阻力特性 [J]. 河海大学学报 : 自然科学版 , 1997 , 25(6) :112-115.

[16] 张也影. 流体动力学 [M]. 北京 : 高等教育出版社 , 1985 : 273-280.

[17] 钱宁 , 万兆惠. 泥沙运动力学 [M]. 北京 : 科学出版社 , 1986 :188-190.

(收稿日期 2009-04-14 编辑 熊水斌)

(上接第 12 页)

图 3 和图 4 是粒子云在时间 $t = 0$ 时 , 在网格坐标 (850 , 2500) 处开始释放 , 即在主流区 , 而不是在海湾环流区。图 3 中粒子按常规布朗运动扩散 ($H = 0.5$) 。观察粒子云的扩散 , 2h 记录 1 次 , 直到扩散 12h 为止。可以看出 , 常规布朗粒子云保持得很密集 , 因为它们是在海湾环流边界外的主流区流动 , 大多数粒子都流过海湾环流区 , 贴着海岸线流到下游去了。一小部分粒子进入环流区 , 也贴着海岸线。图 4 中粒子的扩散位置和图 3 一样 , 但粒子按 fBm 扩散 ($H = 0.75$) 。这时粒子云的传播速度有很明显的增加 , 导致更多的粒子既趋于上游海岸线的低速水流区又向高速主流区运动 , 从而 2h 后与图 3 相比污染物被稀释了。这在自然界中则意味着污染物浓度的迅速降低。从环境的角度来看 , 这也意味着对从原来的有毒水平降到了对生理安全的水平。另外 , 更快的扩散导致更多的粒子进入海湾环流区 , 它也导致环流区中粒子更密集的分布 , 因为粒子不像 $H = 0.5$ 时那样被限制在海岸线边。因此 , 海湾中污染物的增加不一定导致环流区海岸线处的污染物增加。这又证实了一个重要的事实 : Hurst 指数的变化可改变一个流动区域受污染物影响的程度 , 而这种现象是不能靠常规的布朗运动来实现的。

4 结 语

fBm 粒子追踪模型可用来模拟污染物在流体中的传播 , 在推断污染物的去向和浓度中 , Hurst 指数起着很大的作用 , 通过改变 Hurst 指数 , 可以对不同污染程度进行扩散模拟。

fBm 粒子追踪模型将对于用数值建模来模拟环境中污染物的扩散提供一个很好的工具 , 它给任意空间的非线性扩散带来了灵活性和可行性。fBm 粒子追踪模型也较容易推广到带有潮汐速度分量的扩

散过程 , 也可以延伸到 3 维自由表面的扩散模型。

参考文献 :

[1] FISCHER H B , LIST E J , KOH R C Y , et al. Mixing in inland and coastal waters [M]. San Diego , California : Academic Press , 1979.

[2] LAM D C L , MURTHY , C R , SIMPOSON , R B. Effluent transport and diffusion models for the coastal zone [M]. New York : Springer-Verlag , 1984 :17-27.

[3] OSBORNE A R , KIRWAN A D , PROVENZALE A , et al. Fractal drifter trajectories in the kuroshio extension [J]. Tellus , 1989 , 41A :416-435.

[4] SANDERSON B G , BOOTH D A. The fractal dimension of drifter trajectories and estimates of horizontal eddy-diffusivity [J]. Tellus , 1991 , 43A :334-349.

[5] ADDISON P S , QU Bo , NISBET A , et al. A non-Fickian , particle-tracking diffusion model based on fractional Brownian motion [J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids , 1997 , 25 :1373-1384.

[6] ADDISON P S. Fractal and chaos : an illustrated course [M]. London : Institute of Physics Publishing , 1997.

[7] MANDELBROT B B , VAN NESS J W. Fractional brownian motions , fractal noises and applications [J]. SIAM Review , 1968 , 10(4) :422-437.

[8] ADDISON P S , QU Bo , NDUMU A S , PYRAH I C. A particle tracking model for non-fickian subsurface diffusion [J]. Mathematical Geology , 1998 , 30(6) :695-716.

[9] QU Bo. The use of fractional brownian motion in the modelling of the dispersion of contaminants in fluids [D]. Edinburgh : Napier University , 1999.

[10] OKUBO A. Oceanic diffusion diagrams [J]. Deep-Sea Research , 1971 , 18 :789-802.

[11] FISCHER H B. Longitudinal dispersion and turbulent mixing in open-channel flow [J]. Ann Rev Fluid Mech , 1973(5) :59-78.

(收稿日期 2009-05-05 编辑 熊水斌)