1　（特別講演）大気汚染とそのモデリングについて

Modeling for Atomosphetc Pollution

近藤　次郎

Jiro Kondo

国立公害研究所

Natinal Institute For Environmental Studies

抄　録

大気汚染とは大気中に好ましくない物質が存在することである．この汚染物質は気流に乗って輸送され，また大気中の渦によって拡散する．このようにして排出源から離れた距離にある生物に悪い影響を与える．したがって大気中における汚染物質の拡散のメカニズムを解明することは大気汚染防止上きわめて重要である．一方において地球をとりまく大気の総質量は5.16×10^{15} ton，すなわち，1億トンの1億倍ほどもあって，しかも地上17 km以下にその90%までが存在するので，汚染物質が大気中に大量に滞留していても，十分に大気と混合し，その濃度が極めて低い値になればその害は軽減される筈である．

一般に複雑な自然現象を理解するためには条件を制御して実験するか，数学モデルを作成して現象の根本にある法則を表わしたり，現象を数値的に再現したりする．大気汚染の数学モデルにはいろいろなものが提案されている．この論文ではまず数学モデルについて説明し，これらのモデルの特徴を明らかにするとともにモデル選択の方法について述べる．また最後に拡散風洞による実験についても述べる．

1．数学モデルの分類

数学モデルは大きく分けて物理モデルと統計モデルがある．物理モデルは大気中の拡散現象を一つの物理現象と見なし，それを数式をもって記述するものである．一方，統計モデルは大気中における汚染物質の濃度の変化を一つの統計法則として捉えようとするものである．物理モデルには確率モデルと確定モデルとがある．

確率モデル　確率モデルは汚染物質の輸送と拡散とを一種の確率過程とみて，汚染粒子の移動をランダム・モーションと見なし，モンテ・カルロ法によって多数の粒子について合計すれば空間の汚染濃度分布が求められる．

粒子の運動のステップとしてはプラントルの乱流の混合距離lをとればよい．地表からの高さをzとするとき，実験的に

$$l = kz \qquad (1)$$

ととることがある．kは0.4とととられることが多い．

ビルの谷間で交通量が激しい場所ではlを車長の程度にとることもある．

乱流の見掛けの応力は次式で与えられる．

$$\tau = \rho l^2 |\partial U/\partial z| \partial U/\partial z \qquad (2)$$

表．1　大気汚染のモデリングの分類

- モデリング
  - 数学
    - 物理
      - 確率：ランダム運動
      - 確定：拡散方程式，プルーム，パフ，ボックス，etc.
    - 統計：フィルタ理論，多変量解析
  - 実験
    - 相似
    - 類似
    - 拡散風洞実験，熱伝導実験

確定モデル　大気中の汚染物質の濃度Cの変化は，カーテシアン座標について次の乱流拡散方程式で表わされる．

$$\frac{\partial C}{\partial t}+U\frac{\partial C}{\partial x}+V\frac{\partial C}{\partial y}+W\frac{\partial C}{\partial z}$$
$$=\frac{\partial}{\partial x}\left(\mathcal{D}_x\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\mathcal{D}_y\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\mathcal{D}_z\frac{\partial C}{\partial z}\right)$$
$$+\dot{C} \qquad (3)$$

左辺第1項は注目している空間要素の内部の濃度変化，つづく3項は速度U, V, Wをもつ気流によって運搬される濃度，左辺の3項は拡散による変化，最後の項は注目している空間要素の時刻tにおける発生量（湧出しと化学反応による発生）分である．

複合汚染で，汚染物質が多数存在するときにはそれぞれのモル分率をC_iとすれば上のような式が多数できる．このとき厳密には拡散過程は2成分系とは異なるが，大量の空気の中での微量な物質の拡散とするときには空気に対するそれぞれの拡散係数をとっておけば十分である．

拡散の項はドイツの生理学者A. E. Fick（1829－1901）がおよそ百年前に提唱した，いわゆるフィックの法則によっている．プラントルの混合距離の概念を用いると

$$\mathcal{D}_x = l_x^2\left|\frac{\partial Q}{\partial x}\right|, \quad Q=(U^2+V^2+W^2)^{1/2} \qquad (4)$$

等と表わすことができる．

濃度にかんする方程式はCについては線形であるから発生$\dot{C}$がないときには解の重合ができる．発生項があってもそれがC自身に無関係なときにはやはり解の重合ができる．しかるに流速U, V, Wは気象力学（dynamic meteorology）によって解かなければならぬ．このときには地球の自転の影響，気圧，気温の変化を考慮して乱流の場合の運動方程式を解かなければならないが，これは非常に困難で比較的に単純な場合しか解が得られていない．

拡散係数がそれぞれ定数であるときには$\mathcal{D}_x=K_x$，等と書くことにすると上式右辺の拡散項は

$$K_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+K_y\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}+K_z\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \qquad (5)$$

と表わせる．拡散係数はこのようにKで表わされることが多い，そこでK理論などとも呼ばれる．

いま特に$U=V=W=0$と考えると熱伝導の方程式になる，原点に単位の発生源があるときの基本解は

$$C(t,x,y,z)=(4\pi t)^{-3/2}(K_x K_y K_z)^{-1/2}$$
$$\exp\left\{-\frac{1}{4t}\left(\frac{x^2}{K_x}+\frac{y^2}{K_y}+\frac{z^2}{K_z}\right)\right\} \qquad (6)$$

となる．

つぎに流れがあるときには座標系が流れに乗って移動しているものと考えれば上の解がその

表.2 数学モデル選択にあたって考慮すべき要素

空　間	地球的，地域的，都市と郊外，局地的，道路内，建物付近，建物内，室内
期　間	超長期間，長期間，1年，1月，1日，1時間，分，瞬間
利用目的	研究（科学的研究，気象学 等），予測，警報の発令と解除，地域開発計画，工場最適配置，診断および制御，環境規制
汚染源	固定源（主として工場の煙突），移動源（交通機関の排出ガス），定常か非定常か
汚染物質	煙（プルーム，パフ），排出ガス（CO, NO_x, SO_x, HC, PAN），エーロゾル，オキシダント
汚染過程	単純か複合か，光化学反応
他の情報	気象（天気予報の利用），地形（平野，山岳，海岸，峡谷，等），拡散係数

まま用いられる．その時の解は

$$C(t,x,y,z)=(4\pi t)^{-3/2}(K_x K_y K_z)^{-1/2}\exp\left\{-\frac{1}{4t}\left[\frac{(x-Ut)^2}{K_x}+\frac{(y-Vt)^2}{K_y}+\frac{(z-Wt)^2}{K_z}\right]\right\} \quad (7)$$

となる．

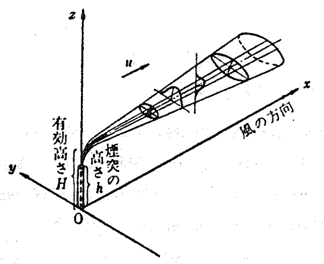
また前の解において，主流がUの方向とし

$$\sigma_y^2=K_y t \ , \quad \sigma_z^2=K_z t$$

とおき流れに垂直な方向の濃度を計算すると

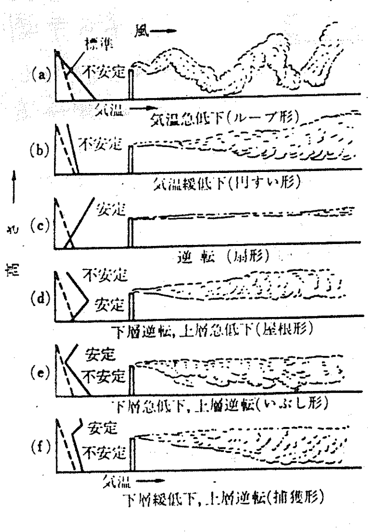
$$C'(x,y,z)=\frac{1}{2\pi\sigma_y\sigma_z U}\exp\left\{-\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2}+\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right)\right\} \quad (8)$$

となる．これは濃度分布がx軸に垂直な断面上では二重正規分布になっていることを示している．このような濃度分布をガウス・プルームと呼んでいる



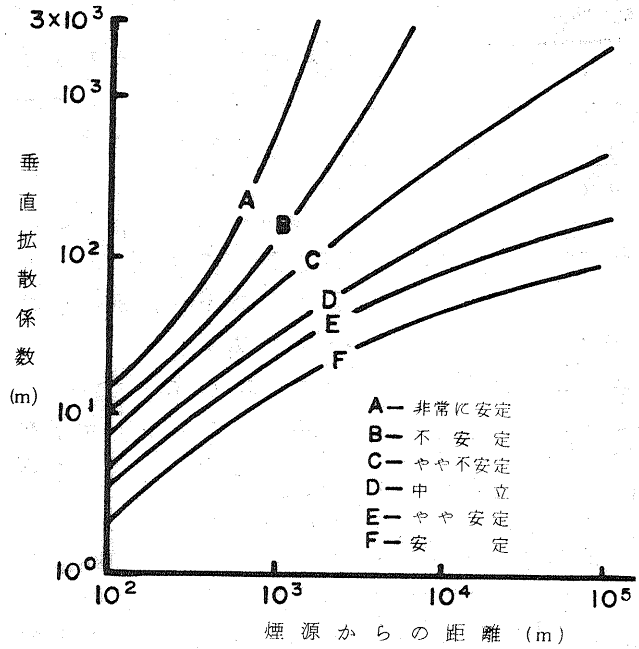
図・1
ガウス・プルーム

煙突の煙の瞬間的な形態は下図に示すように大気の安定度によって異なるが，長い時間の平



図・2
大気安定度と煙

均をとるとガウス・プルームモデルがよくあてはまる．すなわちσ_yやσ_zが気象状態で変化する．それらの値は観測をもとにして *F. Pasquill* によって次図のようにまとめられている．横軸はx(m)，縦軸はσ_z(m)である．多くの計算で



判別

高度10mにおける地上風速 m/sec	日中 入射太陽輻射 強	中	弱	夜 薄曇 曇量4/8以上	曇量3/8以下
< 2	A	A-B	B		
2－3	A-B	B	C	E	F
3－5	B	B-C	C	D	E
5－6	C	C-D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

中立状態は日中および夜中の薄曇状態に対応する。

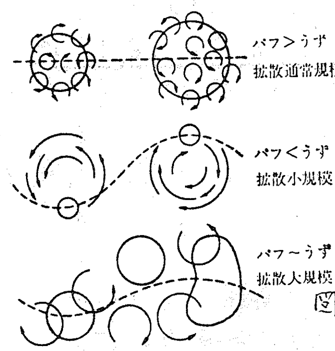
図3 σ_z

は$\sigma_y=\sigma_z$と仮定される．

このほかにもガウス・プルーム型の基本解の重ね合わせによって解を求めるやり方が数多く提案されている．それらは

Turner, Hilst, Martin と Tikvert Robert のモデルである

これらの場合には風向，風速が一定であることが必要であるが，流れが変化する場合には次のパフ・モデルの方が使い易い



図・4
パフ・モデル

2. 統計モデル

統計モデルはある特定の地域または地点の大気の状態の過去のデータを基にして，その地域または他の地点の将来の大気の状態を予測するときなどに利用される。

このときデータの中に含まれている統計的な特性量を利用する。これはその方が生のデータによるよりもサンプリング・エラーによる影響をうけることが少ないからである。

これにはウィナー流のやり方とカルマン・フィルターによる方法とがある。また多変量解析の方法を応用したものとこれをウィナーの理論に拡張したものとがある。

統計モデルの方法は統計データによるものであるから適合性は一般に云って良好であるが，特定の地域，特定の汚染物質についてのみ有効であって，地点が異なり汚染物質が違う場合にはそのまゝでは利用できないことが多い。これに対して前に述べた物理モデルの方は何処でも如何なる物質についても利用できる。

ウィナーの予測理論　ある地点の濃度を時間 t の関数として $C(t)$ と表わすとき，その $(-\infty, t)$ の値を知って将来値 $C(t+\alpha)$ を予測するのに線形予測子 $k(t)$ を用いて

$$C(t+\alpha)=\int_0^{\infty} C(t-\tau)\,k(\tau)\,d\tau \tag{9}$$

のようにする。このとき $C(t)$ のコレログラムを

$$R(\tau)=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{+T/2} C(t+\tau)\,C(t)\,dt \tag{10}$$

とするとき，$k(t)$ はウィナー・ホッフ形積分方程式

$$R(\tau+\alpha)=\int_0^{\infty} R(\tau-\alpha)\,k(\alpha)\,d\alpha \tag{11}$$

の解になることが証明されている。

カルマン・フィルターによる予測　ウィナーの予測理論は確率過程が定常で従ってコレログラムが厳密に求まっているときには明快な予測方法である。しかし非定常な確率過程には用いられない。これは $R(\tau)$ の定義式によっても明らかなように $C(t)$ が $t(-\infty, \infty)$ に亘って得られていなければ厳密には解けない。しかしながら $t\to\infty$ まで $C(t)$ がわかっているならば，本来，予測などは意味のない問題である。

そこで予測子 $k(t)$ をとりあえず仮定して出発し，データの得られるたびにその値を修正して進むことが考えられる。これは一種の適応性（adaptive）を持った予測子である。しかし，このような予測子を決定する方程式は瞬間的に決まらなくてはならないから積分方程式ではなくて微分方程式で表わされなくてはならない。

このようにして考案されたのが1960年，R.E. Kalman によって発表されたいわゆるカルマン・フィルターである。これはシステム誤差および観測誤差が互いに独立で白色ガウス雑音であるというような若干は厳しい仮定を必要とするが非定常確率過程についても利用できるので大気汚染の予測などに利用するにはウィナーの方法よりも使い易い。

国立公害研究所の添田らはこの方法によって確率の高い予測を行った。

Sawaragi, Y., Soeda, T., Yoshimura, T., Ohe, S., Chujo, Y. and Ishihara, H. : Statistical prediction of air pollution levels based on Kalman filtering method, pp. 197-204. IFAC Environmental Systems Planning, Design and Control, 1977, ed. Akashi, H. Pergamon Press (in printing).

多変量解析の方法　大気汚染の予測を行なうときに，天気予報などの情報を利用して多角的に予測した方がより合理的で適中率も高まるように思える。

濃度 C が他の要因 X，Y，Z に関係し

$$C=k_X X+k_Y Y+k_Z Z+e \tag{12}$$

のような1次式で表わされるとするのは多変量解析の技法であるが，これをウィナーの予測理論に拡張して

$$C(t+\alpha)=\int_0^{\infty} X(t-\tau)\,k_X(\tau)\,d\tau+\int_0^{\infty} Y(t-\tau)\,k_Y(\tau)\,d\tau+\int_0^{\infty} Z(t-\tau)\,k_Z(\tau)\,d\tau \tag{13}$$

のように表わすと，予測子 k_X，k_Y，k_Z を決定する方程式はウィナーの時とまったく同様に，C，X，Y，Z のクロス・コレログラムやオートコレログラムによる連立積分方程式等になる。

3. 実験

<u>相似パラメタ</u>　拡散方程式について無次元量を

$t' = t/\tau$, $x' = x/L$, $y' = y/L$, $z' = z/L$, $U' = U/U_\Delta$, $V' = V/U_\Delta$, $W' = W/U_\Delta$ とし，さらに拡散係数 $\mathcal{D}$ についても無次元化して

$\mathcal{D}_x' = \mathcal{D}_x/\mathcal{D}_\Delta$, $\mathcal{D}_y' = \mathcal{D}_y/\mathcal{D}_\Delta$, $\mathcal{D}_z' = \mathcal{D}_z/\mathcal{D}_\Delta$

とすると拡散方程式は発生がないとき

$$\frac{L}{\tau U_\Delta}\frac{\partial C}{\partial t'} + U'\frac{\partial C}{\partial x'} + V'\frac{\partial C}{\partial y'} + W'\frac{\partial C}{\partial z'}$$

$$= \frac{\mathcal{D}_\Delta}{U_\Delta L}\left\{\frac{\partial}{\partial x'}\left(\mathcal{D}_x'\frac{\partial C}{\partial x'}\right) + \frac{\partial}{\partial y'}\left(\mathcal{D}_y'\frac{\partial C}{\partial y'}\right) + \frac{\partial}{\partial z'}\left(\mathcal{D}_z'\frac{\partial C}{\partial z'}\right)\right\}$$

となる．

そこで相似パラメタとして

$$\frac{L}{\tau U_\Delta},\ \frac{\mathcal{D}_\Delta}{U_\Delta L}$$

が得られる．

$L/\tau U_\Delta$ は無次元周期で非定常流れの場合のみ重要になる．定常拡散問題では $\partial/\partial t$ の項は現れないからこのパラメタは問題にならない．

$\mathcal{D}_\Delta/U_\Delta L$ は拡散係数を主流風速と長さで割った値で無次元拡散係数である．$\mathcal{D}_\Delta$ のかわりに K_Δ としてもよい．また $K_\Delta\tau \fallingdotseq \sigma_\Delta$ であるから $\sigma_\Delta/\tau U_\Delta L$ と考えてもよい．

イギリスの気象学者 O. W. Richardson（1879－　）によれば注目する気塊の大きさによって拡散係数 K_y が大きく変わることを示している．これは一定方向の風と見られるものも，もっと大きなスケールから見ると旋風と見られることから，一つの渦の一部となる．

このほかレイノルズ数は

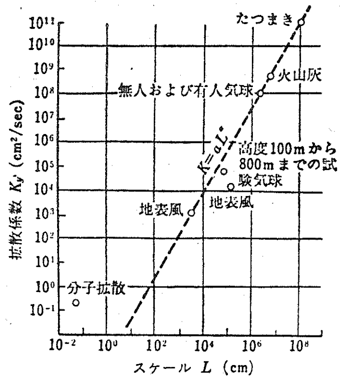
$$Re = \frac{U_\Delta L}{\nu}$$

である．ν は動粘性係数であるが，乱流であるから乱れの粘性係数 ε によれば $\nu = \varepsilon/\rho$ となる．混合距離 l を用いて表わすと

$$\nu = l^2\left|\frac{\partial U}{\partial y}\right|$$

のようにも表せる．

$\nu/\mathcal{D}$ はシュミット数であるが空気の場合にはシュミット数が殆んど1に等しい．そこでレイノルズ数と $\mathcal{D}_\Delta/U_\Delta L$ は殆んど一致する．



図．5
K_y

<u>拡散風洞</u>　大気中における拡散現象を実験する特殊な風洞を拡散風洞という．国立公害研究所の拡散風洞は地上における地表風の分布や気温の分布を再現できるようになる予定である．このようにして，Pasquill の定義したようにいろいろな安定度の大気の状態を作ることができる．

しかし大気拡散の状態は乱れの大きさに関係するから拡散風洞では任意の大きさの乱れを作ることができるとともに固有の乱れを十分に小さくしておく必要がある．

複雑な地形，地物のまわりの流れを解くことはナビエ・ストークスの方程式についても気象力学の方程式についてもいずれも困難である．このときには拡散風洞などによる実験が役に立つであろう．

<u>相似実験</u>　風洞のかわりに水槽を用いて拡散の実験を行なうことができる．しかるに水の動粘性係数は 0.010 cm²/sec で空気は 0.150 cm²/sec であるから1桁小さい．そこで $U_\Delta L$ を実際の場合よりも1桁小さくする必要がある．これは困難ではない．

また水についてはシュミット数が1に近い値をとらないのでレイノルズ数を一致させただけでは十分ではなくて，その上乱れの大きさについても相似則が成立するようにしなければならない．

拡散方程式は流れがないときに，拡散係数が各方向一定であると熱伝導方程式に一致することは前に述べた．そこで熱伝導実験によって

拡散現象を類似し，温度分布を測定して濃度分布$C(t, x, y, z)$を推定することが考えられる。このとき温度拡散係数が拡散係数に対応する。

ルイス数は質量拡散と熱拡散との比で

$$Le = \frac{\rho C_p \mathcal{D}}{\lambda} = Pr / Sc \qquad (15)$$

と書ける。プラントル数すなわち運動量拡散と熱拡散の比をシュミット数すなわち質量拡散と運動量拡散の比で割ったものである。熱伝導実験で類似するにはルイス数が一定であることが必要である。

拡散風洞で速度勾配と温度勾配を再現したときにはこのようなパラメタについても相似性を験めておくことが必要になる。

<u>理論と実験</u>　自然界における現象は再現性にとしいから理論の結果を検証するためにも，また新しい理論を構築する上にも実験を行なうことが望ましい。

大型拡散風洞による実験は流れの可視化の方法によれば大気中の拡散現象を直ちに類似することができる。しかるに大気の安定度によって煙突から出る煙の姿も大きく変化するが，このような複雑な現象を実験するには，相似則について十分に研究しておくことが必要である。

実験の場合にも理論的基礎を十分に確立しておくことが必要である。しかし複雑な地形・地物の付近の拡散の研究には都合がよい。

表・3　拡散研究の理論的方法と実験的方法

比較 / 要目	実験	理論
複雑な地形	都合がよい	都合が悪い
光化学反応	含むことができない	含むことができる
手法	相似則	差分法
道具	大型拡散風洞	大型コンピュータ
誤差	測定誤差	計算誤差

4. 結論

大気汚染の現象は大気の拡散によって支配される。これを完全に理解するには大気中の渦拡散の模構と複雑な地形、地物のまわりの気流とを十分に研究することが必要であって現在までのところ残念ながらまだ十分とは認められない。

現実にはこのほか光化学反応などの複雑な現象が加わるが，この部分についてはここでは割愛した。光化学反応についてはスモッグ・チェンバーなどによってまず十分に現象を解明した上で理論的な反応方程式を確立する方向で研究が進行している。

ここではモデリングを中心に述べた。大気汚染の調査、観測が重要であることは今さら云うまでもないが，たんに現象の記録に止らず，これを予測し制御、管理するためには現象のモデリングが必要である。これは理論的な研究だけに止らず，実験を実施して行くためにも必要である。

しかし実用的に有用なものは対象とする現象に適合するモデリングである。支配する自然法則は根本において同一でも対象とする現象や利用の目的に応じて最適なものが選択されなければならない。

これがモデリングの技法である。そのような技法は実験を行なう場合にも重要である。本論文では理論および実験における現象のモデリングの考え方と実例について述べた。

【参考文献】

紙数の関係もあるのでいちいち原論文を参照することを避けて参考書をあげておく。この中にいろいろな文献がリストされている。

近藤次郎 編　大気汚染 ― 現象の解析とモデル化　コロナ社（1975 初版，1977 再版）

近藤次郎　高速空気力学　コロナ社（1977）

小平吉男　大気力学　岩波物理学講座

Pasquill, F. Atomospheric Diffusion. Van Nostrand (1962)

高松、内藤、Fan　環境システム工学　日刊工業新聞社（1977）

佐々木，小島，柳沢 編　環境工学　講談社 サイエンティフィック（1977）