

確率微分方程式モデルによる移流拡散現象の シミュレーションに関する研究

STUDIES ON SIMULATION OF CONVECTIVE DIFFUSION PHENOMENA
BY USING THE STOCHASTIC DIFFERENTIAL EQUATION MODEL

平岡正勝*・古市 徹**・中條 寛***

By Masakatsu HIRAOKA, Tohru FURUICHI and Hiroshi NAKAZYO

1. はじめに

環境汚染問題等において、汚染物質の拡散伝播プロセスは、移流拡散方程式によって予測されることが多い。本研究は環境中の移流拡散現象の中で、特に大気汚染を例にとって議論する。

大気汚染予測の方法として、従来から模型実験および数値実験の方法がとられてきた。どの方法を用いるかはその目的とするところにより異なるが、最近のコンピューターの急速な発展と気象条件等の観測データ取得技術の向上とにより、数学モデルによるシミュレーションが漸次多用される傾向にある。このような大気汚染予測の数学モデルの中で、本研究の確率微分方程式モデル (Stochastic Differential Equation Model; SDEM) は、数値シミュレーションモデルの Lagrange 的アプローチに分類されるものである。Euler 的アプローチは数学モデルとして移流拡散方程式を用い、有限差分法 (FDM) や有限要素法 (FEM) によって離散化して解く方法であり、安定条件等スキームが満たさなければならない制約条件がある¹⁾。一方、Lagrange 的アプローチは直接流れにのった粒子の運動に注目した数学モデルを用いるもので、モンテカルロ法に代表される方法であり、流れ場の観測データやそれから求められる乱れの構造を直接反映しにくいという欠点がある。SDEM は上記の欠点を補うべく次のような特徴をもっている。すなわち、①観測データとモデルパラメーターとの対応が付きやすい。②数値計算上の安定条件等の制約がない。③移流拡散方程式を用いる方法において、一定とした拡散係数を単純に

スケールアップしただけでは表現できない乱流拡散現象をシミュレートできる。

上記のような特徴を有する SDEM を用いることによって、大気拡散現象を Lagrange 的にシミュレートすることの必要性およびその有効性について論じることが本研究の目的である。以下、まず初めに従来の Lagrange 的方法を整理して各方法の特徴を明確にし、次に確率微分方程式の数学的性質とその離散化モデルである SDEM について考察し、本モデルの位置付けを行った。さらに SDEM を 2 次元一様流について適用し、解析解との比較から拡散係数、拡散幅、積分時間スケールなどについて、Taylor の理論を援用して考察した。また、従来あまり行われていない 2 次元せん断流におけるシミュレーションに、SDEM を応用しいくつかの知見を得た。さらに、現実の大気現象に対する適用可能性を探るため、実際的な大気状態の考慮および 3 次元への拡張についても言及した。

2. Lagrange 的方法について

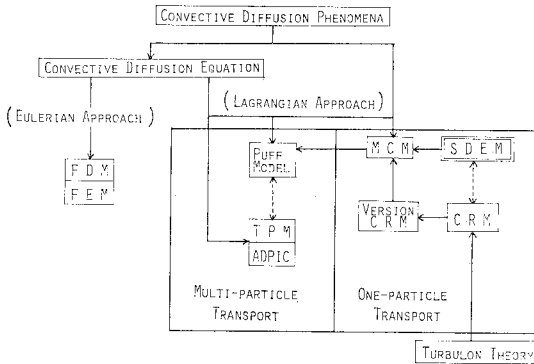
(1) 既存の Lagrange 的方法

流れにのった粒子の運動を Lagrange 的に追いかけて、拡散シミュレーションを行う方法がいくつか考えられており、それらの関係は図-1のように分類できる。これらの手法は大きく分けて、一つの粒子の運動に注目する一粒子移動による方法と、多数の粒子の同時的な運動に注目する多粒子移動による方法とに二分できる。議論の簡潔さのため、以下 1 次元空間で考える。一粒子移動による代表的な方法として、粒子の位置 $X(t)$ が次式で表現される方法を、本研究では Monte Carlo Model (MCM) による方法とよぶことにする。ただし K は乱

* 正会員 工博 京都大学教授 工学部衛生工学科

** 正会員 京都大学助手 工学部衛生工学科

*** 正会員 (株)三菱総合研究所社会システム部



Where FDM: Finite Difference Method
 FEM: Finite Element Method
 TPM: Transport Particle Method
 ADPIC: Atmospheric Diffusion Particle in Cell
 MCM: Monte Carlo Model
 CRM: Complex Random-number Model
 SDEM: Stochastic Differential Equation Model

図一 Lagrange 的方法の分類

流拡散係数である。

$$X(t + \Delta t) = X(t) + \bar{u}\Delta t + \sqrt{2K\Delta t}N(t) \dots\dots(1)$$

ここに、 \bar{u} は流速のアンサンブル平均値、 Δt は時間ステップ、 $N(t)$ は平均値 0、分散 1 の標準正規性白色ノイズである。また、大気汚染の拡散予測モデルとしてよく用いられる Puff Model とは、一つ一つの粒子ではなく多くの粒子 (Puff とよばれ、理論的には無限個の粒子) の全体を、その Puff 中心を $\bar{u}t$ で移動させ、広がりを $2K\Delta t$ なる分散をもつ正規分布の式で計算する手法である。

次に多粒子移動の方法として Atmospheric Diffusion Particle in Cell (ADPIC) 法²⁾ と Transport Particle Method (TPM) について考察する。移流拡散方程式を次のように変形する。

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u_e \bar{c}) &= 0 \\ u_e &= \bar{u} + u_K, \quad u_K = -K \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} / \bar{c} \end{aligned} \right\} \dots\dots(2)$$

ここに、 \bar{c} は濃度のアンサンブル平均値であり、 u_K は拡散速度といわれるものである。ADPIC 法および TPM では MCM と異なり、拡散項の u_K を次のような差分式で計算する。

$$u_K = -\frac{K(c_i - c_{i-1})/\Delta x}{(c_i + c_{i+1})/2} \dots\dots(3)$$

ここに、 Δx はセルサイズであり、 c_i は第 i 番目のセルにおける濃度である。ADPIC 法は、各セル中における粒子数から濃度計算して式 (3) より u_K を計算し、 \bar{u} を加えた u_e によってセル中の各粒子を移動させ、新しく各セル中の粒子数から濃度を再計算するという方法である。他方 TPM は、各セル中の粒子をまず \bar{u} で移動させ、しかる後に u_K を式 (3) から計算し、さらに

u_K で粒子を移動させることにより 1 ステップ経過後における濃度を計算する手法である (ここでいう TPM は、各粒子に濃度を付与していないという点で、神野ら³⁾ のいう粒子移動法とは異なる)。結局、ADPIC 法と TPM とは、 u_K の計算時点を異にしている手法といえる (パフモデルは u_K を遷移確率で評価していると考えられる)。

以上により、一粒子移動と多粒子移動との違いおよび拡散速度の評価方法の違いによって、MCM、パフモデル、ADPIC 法、TPM を説明することができた。

(2) 複合乱数列モデルについて

前述の MCM 等は、乱流拡散現象をただ単にある確率分布に従う不規則現象であるとしてモデル化したものである。しかし実際の乱流拡散においては、不規則であることのほかに、乱流場での粒子拡散の統計的性質も考慮する必要がある。

このような乱流場の統計的構造を考慮したモンテカルロ法として、日野が提案した複合乱数列モデル (Complex Random-number Model; CRM) がある⁴⁾。この方法は、乱流場を記述するのに乱子という抽象化された実体概念を用いる乱子理論⁵⁾を、モデル化してシミュレーションに結びつけた方法である。CRM における粒子の運動 $X(t)$ および変動速度 u' は、次のように与えられる⁴⁾。

$$\left. \begin{aligned} X(t + \Delta t) &= X(t) + (\bar{u} + u')\Delta t \dots\dots(4) \\ u' &= \sum_{n=0}^{\infty} V_n \left(\frac{\tau_n}{\tau_0}\right)^{1/2} N_n, \quad V_n = \sqrt{u'^2} / \sqrt{\sum_{n=0}^{\infty} (\tau_n/\tau_0)} \end{aligned} \right\} \dots\dots(5)$$

ここに、 τ_n は第 n 階級の乱子の平均寿命時間で、乱子エネルギーを一定の割合で消費するのに要する時間の平均である。また、 N_n は平均値 0、分散 1 の標準正規乱数であり、第 n 階級乱子の平均寿命時間の間では同じ乱数を保持するものとする。すなわち、各階級の乱子はその τ_n に応じた期間ごとに、一定の乱子速度を持続するものとする。

次に、CRM と前述の MCM との関係について検討する。第 n 階級の乱子拡散係数 K_n について次のような関係がある⁵⁾。ただし ϵ は乱子エネルギー逸散率であり、 V_n は第 n 階級の乱子速度の乱れの強さである。

$$K_n = \epsilon \tau_n^2 = \tau_n V_n^2 \dots\dots(6)$$

式 (6) を用いると式 (5) は次のように変形できる。

$$u' = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sqrt{K_0 \tau_n}}{\tau_0} N_n \dots\dots(7)$$

式 (7) によって変動速度 u' を計算するモデルを、今ここでは仮に変形 CRM とよぶ。変形 CRM は、CRM と MCM とを関係付けるために導入し、乱子拡散係数 K_n に注目した表現であり、 K_0 を次のようにおくと従来

の CRM の表現と一致する。

$$K_0 = \frac{\overline{u'^2} \tau_0^2}{\sum_{n=0}^{\infty} \tau_n} \dots\dots\dots (8)$$

また、式 (7) から N_n の独立性を仮定して、 Δt 時間後の粒子の移動量 $u' \Delta t$ の分散を計算すると次のようになる。

$$\text{Var}[u' \Delta t] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{K_0 \tau_n}{\tau_0^2} (\Delta t)^2 \dots\dots\dots (9)$$

一方、MCM における同様の移動量 $u' \Delta t$ の分散は式 (1) より $2K \Delta t$ とわかっているので、式 (9) と等しいとおくことによって次の関係が得られる。

$$K = K_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau_n \Delta t}{2 \tau_0^2} = \overline{u'^2} \cdot \frac{\Delta t}{2} \dots\dots\dots (10)$$

すなわち、式 (6) と式 (10) から MCM は、変形 CRM において平均寿命時間が $\Delta t/2$ となるような一つの乱子階級に集約したものと考えられる。また式 (10) より、乱流場の全体的な K を求めるとき、その場の最大乱子 (K_0 に対応) の運動に着目して、 K を K_0 に比例して求められることがわかる。

以上より、一粒子移動である CRM と MCM との関係が明らかになり、図-1 のように CRM を位置付けることができる。本研究の分類とは異なっているが、乱流場での粒子拡散の統計的性質を考慮する他の方法として、Euler スペクトルから乱流場を発生させ粒子の移動をシミュレートする方法がある^{15),16)}。

3. 確率微分方程式モデルについて

乱流拡散現象をシミュレートするためには、乱流場での粒子拡散の統計的性質を考慮して、不規則現象を Lagrange 的にシミュレートする必要がある。しかし、MCM では不規則項として白色ノイズを仮定するため拡散の統計的性質を考慮できず、また CRM では乱子階級の数およびスケール等を観測データから事前に決定することが困難である。したがって、本研究ではこれらの欠点を補うべく確率微分方程式を用いた方法について検討する。

大気拡散過程のシミュレーションモデルとして、確率微分方程式を用いる考えは、すでに J.A. Bullin らによって提案されている⁹⁾。しかし、それはハイブリッドコンピュータの使用を前提としている。本研究のように乱数発生に特色を有するデジタルコンピュータを用いて、Taylor の理論との比較という観点からの大気汚染への適用はまだなされていない。

(1) 確率微分方程式について

乱流拡散について議論する前に、元来分子拡散を記述

する確率微分方程式と移流拡散方程式との関係を明確にする。分子拡散現象は、粒子群による Brown 運動として説明され、一般には離散的な random walk のモデルを用いて直観的に理解される。そしてこの確率モデルの極限操作によって、Fick の拡散方程式が導かれる。しかし現実の Brown 運動が連続的に挙動することを考慮すると、Brown 運動を確率過程として数学的に定式化した Wiener 過程をはじめから用いる方が厳密といえる。したがって、流体中における粒子の分子拡散による移動は、流体の平均的移動と流体中での粒子の Brown 運動との和として、次の微分方程式で表現できる。

$$dX(t) = a(X, t)dt + b(X, t)dw(t) \dots\dots\dots (11)$$

ここに、 $X(t)$ は時刻 t における粒子の位置を表わす確率変数である。 $a(X, t)$ は流体の平均速度を、 $b(X, t)$ は Brown 運動を特徴付ける流体に固有な量を表わすパラメーターである。また、 $w(t)$ は Wiener 過程であり、形式上次のように表現できる⁹⁾。

$$dw(t) = N(t)dt \dots\dots\dots (12)$$

ここに、 $N(t)$ は平均値 0、分散 1 の標準正規性白色ノイズである。式 (11) は、伊藤型確率微分方程式といわれるものである。このとき式 (11) の解は Markov 過程に従い、解の存在と一意性についても証明されている⁹⁾。式 (11) は、次の Fick の拡散方程式と式 (14) の関係で対応していることはよく知られている。

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \{u(x, t)c(x, t)\} \\ = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{D(x, t)c(x, t)\} \dots\dots\dots (13) \end{aligned}$$

$$\begin{cases} u(x, t) = a(x, t) \\ D(x, t) = \frac{1}{2} \{b(x, t)\}^2 \end{cases} \dots\dots\dots (14)$$

ただし、 $c(x, t)$ は濃度、 $u(x, t)$ は速度、 $D(x, t)$ は分子拡散係数である。

したがって、多くの粒子について式 (11) を解くことにより、Lagrange 的に粒子の軌跡を追いかけて分子拡散現象をシミュレートできることがわかる。

(2) SDEM の導出

式 (11) は分子拡散に対応する式であるから、乱流拡散をも記述できるようにするためには、適当な平均化の操作が必要である。よく知られている Fick の拡散方程式に関する平均化の操作とアナロジーに、ここでは式 (11) に対して平均化を行うことを考える。ただし、Lagrange 量と Euler 量とを区別するため、それぞれ L, E と添字をつける。

$$u_L(x_0, t) = \bar{u}_L(x_0, t) + u_L'(x_0, t) \dots\dots\dots (15)$$

ただし、 $X(0) = x_0$

ここに、 $\bar{\quad}$ は統計的の平均、 $'$ は乱れによる変動を表わ

す。観測が困難である Lagrange 量は、観測可能な Euler 量に置き換えられる必要がある。粒子が時刻 t の瞬間に $X(t)$ に存在し完全に流れに追従するものと考え、エルゴード性が成立すると仮定することにより次の関係を得る。

$$\bar{u}_L = \bar{u}_E \dots\dots\dots (16)$$

次に Lagrange 変動 u_L' を、次のように分解する。

$$u_L' = v_L M_L(t), \quad v_L \triangleq \sqrt{u_L'^2} \dots\dots\dots (17)$$

ただし、 $M_L(t)$ はパワーが1で、Lagrange 変動速度 u_L' と同じ自己相関構造をもつ有色ノイズである。また Hay と Pasquill⁹⁾によれば、通常の大気状態では次式が成り立つ。

$$v_L = v_E, \quad v_E \triangleq \sqrt{u_E'^2} \dots\dots\dots (18)$$

したがって、式 (11) に式 (15)~(18) の関係を代入すると次式が得られる。

$$dX(t) = \bar{u}_E(X, t) dt + v_E(X, t) M_L(t) dt + [2D(X, t)]^{1/2} N(t) dt \dots\dots\dots (19)$$

式 (19) が、われわれが適用しようとしている SDEM の基礎式であり、右辺第1項は移流、第2項は乱流拡散、第3項は分子拡散による粒子の移動を表わすと考えられる。有色ノイズ $M_L(t)$ の発生仕方については後述するとして、式 (19) は観測可能な Euler 量のみから成り、この式を数値的に解くことにより観測データと結びついたシミュレーションが可能となる。一般に移流拡散現象では、分子拡散による粒子の移動は乱流拡散によるものよりかなり小さいと考えられるので、分子拡散による移動は通常考えないものとして計算する場合が多い。

(3) SDEM の位置付け

図-1 で示したように、SDEM を MCM および CRM と比較し、その位置付けについて考察する。まず MCM との関係を検討する。SDEM の有色ノイズ $M_L(t)$ は、Lagrange 変動速度 u_L' と同じ自己相関構造をもつように発生される。このとき、SDEM をシミュレートする時間ステップ Δt を大きくしていくと、ある Δt_N 以上ではほぼ相関がなくなり白色ノイズとみなすことができるようになる。したがって、式 (19) による SDEM の右辺第2項と式 (1) による MCM の右辺第3項の乱流拡散による変動成分を等しいとおき、 $M_L(t) \doteq N(t)$ を考慮することによって、次の関係が得られる(ただし分子拡散項は無視している)。

$$K = \overline{u_L'^2} \cdot \frac{\Delta t_N}{2} \dots\dots\dots (20)$$

また、Taylor の理論によると乱流拡散係数 K は、拡散時間が十分に大きい場合には次のように与えられる¹⁰⁾。

$$K = \overline{u_L'^2} \cdot T_L = \text{const.} \dots\dots\dots (21)$$

ここに T_L は、 u_L' の自己相関関数を $R_L(\xi)$ とすると次のように定義され、積分時間スケールとよばれる。

$$T_L = \int_0^\infty R_L(\xi) d\xi \dots\dots\dots (22)$$

式 (20) を式 (21) の観点からながめることにより次の関係を得る。

$$\Delta t_N = 2 T_L \dots\dots\dots (23)$$

すなわち、拡散時間が十分に大きい場合には、SDEM はシミュレーション時間ステップ Δt を積分時間スケール T_L の2倍以上にとることにより、MCM と近似的に同等にできることがわかる。もちろん、 $\Delta t < \Delta t_N$ のときは u_L' に相関があるために、SDEM と MCM とは異なる。

次に、SDEM と CRM との関係について検討する。変形 CRM における式 (10) と SDEM における式 (20) とは、MCM との対応に関してアナロジークな関係といえる。すなわち、変形 CRM においては平均寿命時間(積分時間スケールとも考えられる)が $\Delta t/2$ となるような一つの乱子階級に集約することにより、また SDEM においては u_L' の相関がほぼなくなる Δt_N をとることにより、近似的に MCM を表現できることがわかる。このように SDEM と CRM とは、本来異なったモデルであるが MCM を介して対応関係にある。また、SDEM および CRM の特徴の一つとして、拡散幅の2乗平均 \bar{Y}^2 については次の Taylor の理論¹⁰⁾に従うことが、以下のシミュレーション例において示されるであろう。

$$\bar{Y}^2 = 2 \overline{u_L'^2} T_L^2 \left[\frac{T}{T_L} - \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{T}{T_L}\right) \right\} \right] \dots\dots\dots (24)$$

ただし、 T はシミュレーション時間であり、 $R_L(\xi) = \exp[-\xi/T_L]$ と仮定している。風の乱れの大きさや Euler 相関は他の量より比較的容易に観測可能であり、SDEM ではこれらのデータを直接モデルに反映できるが、CRM においては各乱子階級をデータから同定しなければならず、これは一般に困難である。

4. シミュレーションの方法

(1) 有色ノイズの発生方法

いかにすれば実際の大气乱流場を再現できるか、換言すれば、風速に関する観測データから対象場の統計的な風の相関構造をどのように再現するかが、SDEM のシミュレーション精度にとって重要な問題となってくる。本研究において有色ノイズ $M_L(t)$ は、風速の観測データから求めた Euler 相関を Lagrange 相関に変換して求める。ここでは Lagrange 相関 R_L と Euler 相関

R_E は同じ型をもち、その時間スケールの比 τ が異なるとして次のような関係にあるものと仮定する⁹⁾。ただし本研究では $\tau=4$ としている。

$$R_L(\xi) = R_E(\tau), \xi = r\tau \dots \dots \dots (25)$$

また、 $M_L(t)$ は次の自己回帰 (AR) モデルによって生成されるものとする。

$$M_L^n + a_1 M_L^{n-1} + \dots + a_p M_L^{n-p} = N^n \dots \dots (26)$$

ここに、 M_L^n は $M_L(t)$ を $t=n\Delta t$ と離散化表示したものであり、 N^n は平均値 0、分散 σ_N^2 の正規性白色ノイズとする。自己相関関数を $r_k = E[M_L^{n-k} \cdot M_L^n]$ とし、規格化した相関関数を $\rho_k = r_k/r_0$ とする。このとき式 (26) の AR モデルに対応して、次の Yule-Walker 方程式が導かれる。

$$\rho_k + a_1 \rho_{k-1} + \dots + a_p \rho_{k-p} = 0 \dots \dots \dots (27)$$

またこのとき、 M_L^n の分散 σ_M^2 は次のように求められる¹¹⁾。

$$\sigma_M^2 = r_0 = \sigma_N^2 / (1 + a_1 \rho_1 + \dots + a_p \rho_p) \dots \dots (28)$$

したがって、平均値 0、分散 1 の有色ノイズ M_L^n は次のような手順で発生される。まず観測データから R_E を計算して式 (25) より R_L に変換し、次に $R_{Lk}(=r_k)$ より ρ_k を計算して式 (27) に代入する。そして式 (27) をパラメーター a_k ($k=1, 2, \dots, p$) について解き、式 (28) より $\sigma_M^2=1$ となるように σ_N^2 を決定する。以上より AR モデルが同定でき、式 (26) より M_L^n が発生できることになる。

式 (26) の AR モデルの次数 p は、赤池の AIC 基準¹²⁾等により、客観的に決定されるべきである。しかし、本論文においては SDEM を大気拡散へ適用する方法を論じることが目的であるから、以下のシミュレーション例においては、自己相関関数 r_k を指数型としかつ次数 $p=5$ と仮定して M_L^n を発生するものとする。ただし、 r_k が指数型のときは、1次 ($p=1$) の AR モデル M_L^n で理論上厳密に確率過程 $M_L(t)$ を離散表示できることがわかっている¹¹⁾。したがって、今の場合 $p=5$ としたのは、観測データから r_k を求めたとき必ずしも指数型とならない場合を想定してモデルを作成したためである (r_k が指数型のとき、 $p=1$ と $p=5$ ではほぼ同じ有色ノイズ M_L^n が発生できることが、スペクトル解析の結果より確かめられている)。

(2) SDEM の設定条件

放出粒子を Lagrange 的に追跡することによって拡散シミュレーションを行うとき、いくつくらいの個数の粒子を飛ばし、計算時間をどのぐらいにすれば満足のいく計算ができるかということは、実際問題として重要である。先に述べた伊藤型確率微分方程式による粒子の Lagrange 的シミュレーションと、Fokker Planck eq.

で示されるその遷移確率密度関数との関係の議論からもわかるように、無限個の粒子の軌跡を重ね合わせて基準化すると、理論上は濃度分布のアンサンブル平均が得られることが推察できる。一方、現実に観測される濃度は、有限時間内における時間平均濃度である。この一つの実現値としての時間平均濃度と、非現実的な無限回観測によって得られる濃度のアンサンブル平均値を比較するためには、濃度場が時間的に変化しない steady な状態であり統計的に定常エルゴード性を満たさなければならない。すなわち、一定強度の連続煙源を想定し、濃度のアンサンブル平均を時間平均で置き換えなければならない。このように考えることにより、計算値と観測値とをアンサンブル平均値という共通のベースで比較議論することができることになる。したがって、steady な濃度場のアンサンブル平均値を Lagrange 的方法 (SDEM を用いる) によって計算することに主眼を置くと、シミュレーション時間をいくらにし、放出粒子数をいくつくらいにすれば、ほぼアンサンブル平均とみなせるかということが議論されなければならない。いま N_m 個の粒子を飛ばすものとし、濃度計算のために空間をメッシュに切り、粒子数を加え合わせるメッシュサイズを δV とする。いまは steady な濃度場を想定しているから、濃度分布は時間に関して stationary であると仮定し N_m 個の粒子の軌跡を重ね合わせて濃度計算をすればよい。一定強度の単位連続煙源に対する i 番目のメッシュ δV_i の濃度は、メッシュ内の粒子のカウント数を n_i として $n_i / (N_m \delta V_i)$ と計算される。そして計算対象領域が決まれば、 N_m 個の粒子すべてが領域を通過するのに要する計算時間が求まり、これを steady な濃度場に達する定常到達時間 (T_s) と考えることにする。また、放出粒子数 N_m を ΔN_m 個ずつ増加させたとき、各メッシュでの濃度の変化率 $(= (n_i + \Delta n_i) / (N_m + \Delta N_m) \delta V_i - n_i / N_m \delta V_i)$ の絶対値の領域全体での総和が、あらかじめ設定した基準値以下になったときの粒子数を必要粒子数 (N_c) と考えることにする。このとき、 T_s は N_m によって異なってくるものと、 T_s と N_c は同時に決定することができないことを考えて、本研究においては、仮に $N_m=1000$ 個として T_s を求めることにする。そしてこの場合 N_c の値は、対象領域や風の場の構造等設定条件によって異なることが、後述のシミュレーション例のところでわかる。

本研究においては、観測値との比較を考慮して、steady な濃度場を想定してシミュレーションを行った。しかし、SDEM による方法自身は steady な濃度場の計算に限定されるものではない。たとえば、排出源 $Q(x, t)$ は位置 x と時間 t に関して任意の関数でよく、また unsteady な濃度計算も可能である。この場合は、各粒

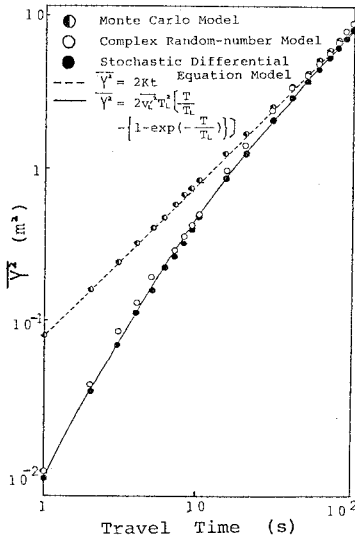


図-2 各方法による y 方向の分散 \bar{Y}^2 の比較

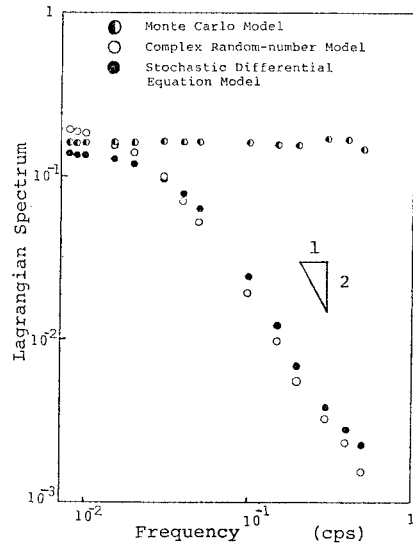


図-3 各方法による速度変動の Lagrange スペクトル

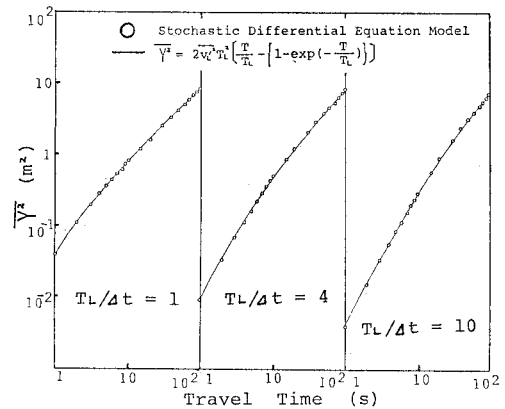
子の軌跡を重ね合わせるという計算ではなく、各時間ごとに何個かずつ放出された全粒子が、ある瞬間にどのメッシュに入っているかを計算して濃度分布を求めることになる。

5. 大気拡散におけるシミュレーション例

(1) 2次元一様流におけるシミュレーション

計算領域としては、風下 (x 方向) 距離 200 m, y 方向の幅 ± 10 m の水平 2 次元の矩形領域とし、場は等方等質であり、 x 方向のみ平均風速 $\bar{u}=2$ m/s をもつ一様流であると想定している。SDEM によるシミュレーションは、Lagrange 相関 $R_L(\xi)=\exp(-\xi/T_L)$ と指数型を仮定し、1000 個の粒子の放出から定常到達時間 T_s を 120 秒と求め、時間ステップ Δt は 1 秒としている。counting net の大きさは $\Delta x=4$ m, $\Delta y=0.5$ m とし、煙源 $S(0, 0)$ の位置から粒子を放出するものとする。ここでは定常濃度を問題とするため、Taylor の One Particle Analysis に従って解析を行った。図-2 に SDEM, CRM, MCM の各方法による y 方向の分散 \bar{Y}^2 の比較を示している。MCM については、定数係数の拡散方程式から解析的に求められる $\bar{Y}^2=2Kt$ の理論線にのっていることがわかる。また SDEM と CRM については、3. の (3) のところで述べたように Taylor の理論に従っていることがわかる。図-3 に SDEM, CRM, MCM の各方法による速度変動の Lagrange スペクトルを示している。SDEM と CRM については、ほぼ周波数に関して -2 乗則が成り立っている。

次に、 T_L による拡散状況の変化をみるために、SDE



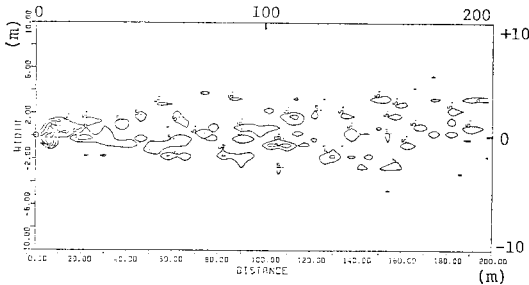
Where T_L : Integral Time Scale
 Δt : Time Step

図-4 $T_L/\Delta t$ の違いによる \bar{Y}^2 の変化

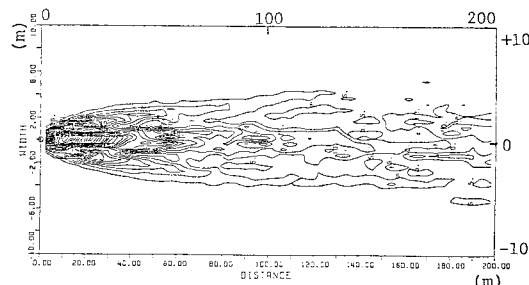
M について $K=vE^2 \cdot T_L (=0.04 \text{ m}^2/\text{s})$ を一定としながら、 $T_L/\Delta t$ の比をそれぞれ、1 ($T_L=1 \text{ s}$, $vE^2=0.04 \text{ m}^2/\text{s}^2$), 4 ($T_L=4 \text{ s}$, $vE^2=0.01 \text{ m}^2/\text{s}^2$), 10 ($T_L=10 \text{ s}$, $vE^2=0.004 \text{ m}^2/\text{s}^2$) とした場合の分散 \bar{Y}^2 の変化の様子を図-4 に示している。それぞれ式 (24) から計算した Taylor の理論線にのっているが、勾配が違っており拡散傾向が異なってくるのが想像できる。このことを確かめるために、 $T_L/\Delta t=1, 4, 10$ に対応して、SDEM によるシミュレーション結果と解析解 (Appendix の式 (A-2)) との差をそれぞれ 図-5 の (a), (b), (c) に示している (各図上の数値は、単位排出源に対する濃度差であり、 10^{-3} をその単位としている。以下の図-6~10 についても同様である)。これらの図より SDEM は、 $T_L/\Delta t$ が小さいと解析解に近づき、大きくなると解析解

表-1 2次元せん断流におけるシミュレーションの計算条件と結果

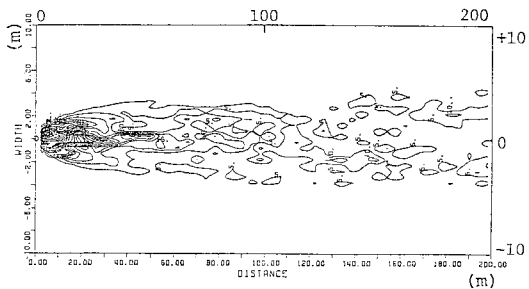
Run No.	Fig. No.	H_e (m)	T_L (s)	v_E^2 (m ² /s ²)	α	β	T_s (s)	N_c (個)	DEF($\times 10^{-3}$)	T_{eal} (s)
1	6	0	1	0.04	1/7	—	151	2300	0.710	59.7
2	7	0	1	0.04	1/2	—	325	2100	1.370	115.7
3	8	0	—	0.01	1/7	1/5	161	2000	0.710	275.5
4	9	0	—	0.01	1/7	1	174	1300	6.670	194.9
5	10	3	—	0.01	1/7	1/5	145	2500	0.415	309.8



(a) $T_L/\Delta t=1$



(b) $T_L/\Delta t=4$



(c) $T_L/\Delta t=10$

図-5 $T_L/\Delta t$ の違いによる SDEM と解析解との差

との差は遠い風下距離にまで及ぶことがわかる。これは、乱流拡散係数が一定であると解析解から(移流拡散方程式の FEM あるいは FDM による数値計算の場合についても)拡散状況は一通りに決定されるが、SDEM によると T_L (あるいは v_E^2) が異なれば拡散状況が大きく違ってくることを示している。実際の大気の流れ場においては、統計的な積分時間スケール T_L や速度変動の 2 乗平均 v_E^2 がその場に固有のものとして存在し支配因子となるので、これらを考慮した拡散のシミュレーションが行えるという観点から、SDEM はより現実的

なシミュレーション手法であると考えられる。

(2) 2次元せん断流におけるシミュレーション

(1) において、一様流中におけるシミュレーションを通して、SDEM が乱流拡散についての統計理論である Taylor の理論によく適合していることがわかった。次に、SDEM をせん断流に応用することを考える。計算領域としては、風下 (x 方向) 距離 200 m、高さ (z 方向) 50 m の鉛直 2 次元の矩形領域とする。煙源高さを H_e とし、 $S(0, H_e)$ より粒子は放出されるものとする。地表面では、粒子は完全反射するものと仮定する。平均風速鉛直プロファイルとしては、解析解としての Walters あるいは Roberts の式 (Appendix を参照) と比較するために、次のようなべき乗則を用いることにする¹⁴⁾。

$$\bar{u} = \bar{u}_1 (z/z_1)^\alpha \dots \dots \dots (29)$$

ここに、 \bar{u}_1 は高さ z_1 における水平平均風速であり、 α はべき指数である。流れ場は x 方向に等質であり、 z 方向への平均風速は 0 とする。

また、通常の大気においては地表面の存在のため、鉛直方向に非等質となり積分時間スケール T_L や 2 乗平均速度変動 v_E^2 は鉛直方向に変化する。しかし本研究においては、Lagrange 相関 R_L は一様流と同様に指数型を仮定し、 v_E^2 は x 方向、 z 方向とも同じものとし、 z 方向の積分時間スケール T_{Lz} のみ Walters あるいは Roberts の式における仮定とのアナロジーから、次のように鉛直方向に変化するものと仮定する。

$$T_{Lz} = T_{L1} (z/z_1)^\beta \dots \dots \dots (30)$$

ここに、 T_{L1} は高さ z_1 における積分時間スケールであり、 β はべき指数である。

シミュレーションは、まず 1000 個の粒子を用いて定常到達時間 T_s を求め、次に定常濃度を表現できると考えられる必要粒子数 N_c を計算し、これらをもとに各ケースを実行する。counting net は $\Delta x=4$ m、 $\Delta z=0.5$ m、 $\bar{u}_1=2$ m/s、 $T_{L1}=4$ s とする。各ケースについてのその他の計算条件については、表-1 のとおりであり、また各ケースのシミュレーション結果とその図番号との対応も示している。表中の DEF は解析解と SDEM との差の指標であり、風下距離 100~200 m、解析解の拡散幅 σ 内での単位煙源に対するそれぞれの濃度の差の絶

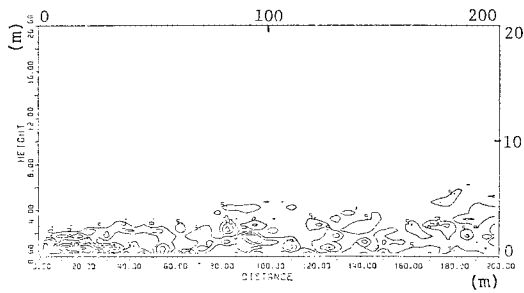


図-6 2次元せん断流における SDEM と解析解との差 (Run 1)

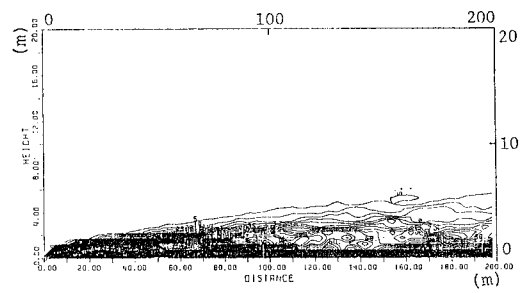


図-9 2次元せん断流における SDEM と解析解との差 (Run 4)

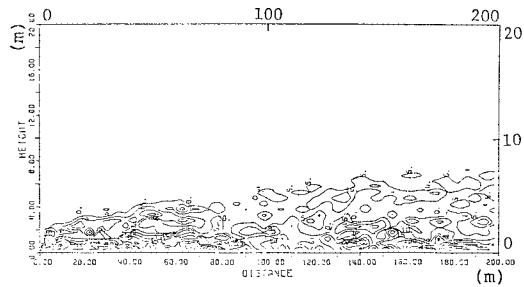


図-7 2次元せん断流における SDEM と解析解との差 (Run 2)

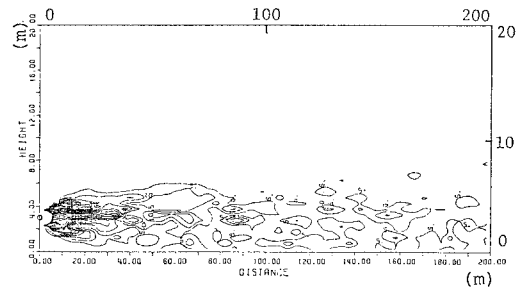


図-10 2次元せん断流における SDEM と解析解との差 (Run 5)

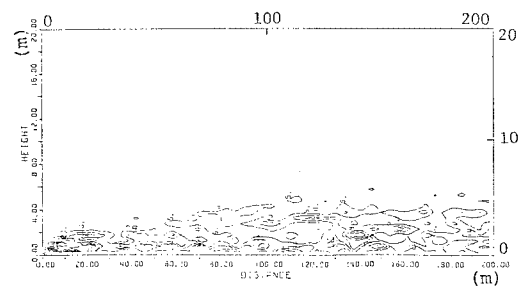


図-8 2次元せん断流における SDEM と解析解との差 (Run 3)

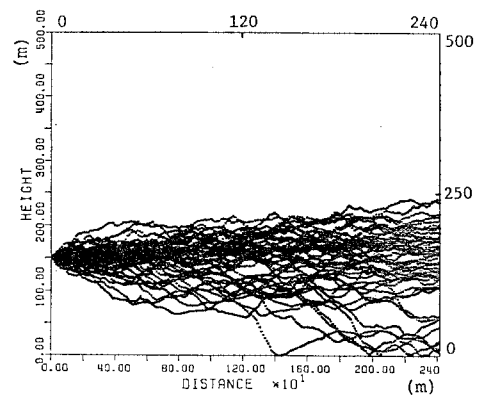


図-11 Fumigation の例 (50個の粒子の軌跡)

対値を平均したものである (これは拡散時間が十分たち、SDEM の拡散幅が解析解のものとはほぼ等しくなる部分での比較を行うためである)。

図-6~10 を比較することにより、次のようなことが考察できる。

① 図-6 と 図-7 より、 \bar{u} のべき指数 α が大きいほど SDEM と解析解との差が大きくなる (大気状態で $\alpha=1/7$ は中立状態、 $\alpha=1/2$ は安定状態に対応する)。

② 図-8 と 図-9 より、 T_{Lz} のべき指数 β が大きいほど SDEM と解析解との差が大きくなる (\bar{u} のべき指数 α による差より大きくなる傾向があり、これは SDEM が T_{Lz} の変化の影響を直接シミュレートできる手法であるためと考えられる)。

③ 図-8 と 図-10 より、煙源高度 H_e が低いほど SDEM と解析解との差が大きくなる。

6. おわりに

本研究は、環境汚染問題における汚染物質の移流拡散現象を確率微分方程式モデルを用いて解析することを最終目的として、今回は大気汚染に議論を限定してモデルの有効性等について検討した。

本研究の SDEM を一様流およびせん断流に対して適用することによって、従来の Euler 的アプローチでは表現しきれない乱流拡散現象を、SDEM によってシミュレーションできる可能性を Taylor の理論を援用して説明した。現実の大気状態を想定したシミュレーションでも、SDEM によって拡散状況を定性的に表現でき、

その一例として Fumigation の例 (50 個の粒子の軌跡) を 図-11 に示している. また SDEM では, 3 次元への拡張は追跡する座標が一つ増すだけで Euler 的アプローチに比べて計算時間・記憶容量等において有利と考えられ, さらに複雑な地形を有する場への適用も Euler 的アプローチに比べ境界条件等の設定が容易と考えられる. これらのシミュレーション例については今後の課題としたい.

本論文において得られた結論は次のようである.

(1) 従来の Lagrange 的方法を整理して, 各手法の位置付けを明確にし, SDEM との関係性を明らかにした.

(2) SDEM と伊藤型確率微分方程式との関係を合理的に説明することができた.

(3) SDEM と CRM はともに Taylor の理論に従うが, SDEM の方が観測データとモデルパラメータとの対応がよりつきやすいことが示せた.

(4) 移流拡散方程式を用いる方法において, 一定とした乱流拡散係数を単純にスケールアップしただけでは表現できない乱流拡散現象を, SDEM によるとシミュレートできることが, 指標 T_L/dt によるシミュレーション結果からわかった.

(5) 数値計算上の安定条件等の制約がないので, 粒子数を増やすことによって計算精度の向上を期待できることがわかった.

最後に, 使用した計算機は京都大学大型計算機センターの FACOM M-200 である.

Appendix¹³⁾

連続点源が, 等方な水平 2 次元一様流中にあるとき, 定常濃度 $c(x, y)$ は次の移流拡散方程式に支配される.

$$u \frac{\partial c}{\partial x} = K \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + M\delta(x, y) \dots\dots\dots(A.1)$$

ここに, u は x 方向の一定流速, K は乱流拡散係数, M は一定連続点源の強度, $\delta(x, y)$ はデルタ関数である. この式の解析解は次のように求められている.

$$c(x, y) = \frac{M}{2\pi K} \exp\left\{\frac{ux}{2K}\right\} K_0\left[\frac{u(x^2+y^2)^{1/2}}{2K}\right] \dots\dots\dots(A.2)$$

ここに, K_0 は第 2 種の変形 Bessel 関数である.

また, 鉛直 2 次元せん断流中の定常濃度 $c(x, z)$ が次のようにモデル化される場合を考える.

$$u(z) \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(z) \frac{\partial c}{\partial z} \right] + M\delta(x, z-h) \dots\dots\dots(A.3)$$

$$u(z) = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m, K(z) = Az^n \dots\dots\dots(A.4)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{B.C. 1 } -K \frac{\partial c}{\partial z} &= 0 \text{ at } z=0 \\ \text{B.C. 2 } c &= 0 \text{ at } z=\infty \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(A.5)$$

式 (A.3)~(A.5) に対する解析解は, Walters によって次のように求められている.

$$c(x, z) = \frac{BMh^{2a+b-1}}{2axz^b} \exp\left\{-\frac{B(h^{2a}+z^{2a})}{4a^2x}\right\} \times I_p \left[\frac{Bh^a z^a}{2a^2x} \right] \dots\dots\dots(A.6)$$

$$\text{ただし, } B = \frac{u_1}{Az_1^m}, p = \frac{b}{a} = \frac{n-1}{2+m-n}$$

$$a = 1 + \frac{m-n}{2}, b = \frac{n-1}{2}$$

I_p : 第 1 種変形 Bessel 関数

さらに, 式 (A.6) において, 点源高さ h を 0 とした極限を考えると Roberts の次の結果が得られる.

$$c(x, z) = \frac{(m-n+2)z_1^q Mh^m}{z_1^m \Gamma(s)} \times \left[\frac{u_1}{(m-n+2)^2 Az_1^n x} \right]^s \times \exp\left\{-\frac{u_1 z^{m-n+2}}{(m-n+2)^2 Az_1^m}\right\} \dots\dots\dots(A.7)$$

$$\text{ただし, } \Gamma(s) = \int_0^\infty e^{-t} t^{s-1} dt,$$

$$s = \frac{m+1}{m-n+2}, q = \frac{m+n}{m-n+2}, m-n+2 > 0$$

参 考 文 献

- 1) 平岡正勝・吉市 徹・田中宏明: 移流拡散方程式の数値解の安定性解析, 土木学会論文報告集, No. 319, pp. 77~85, 1982.
- 2) Lange, R.: ADPIC—A Three-Dimensional Particle-in-Cell Model for the Dispersal of Atmospheric Pollutants and its Comparison to Regional Tracer Studies, J. of Appl. Met., Vol. 17, pp. 320~329, 1978.
- 3) 神野健二・上田年比古: 粒子の移動による移流分散方程式の数値解法の検討, 土木学会論文報告集, No. 271, pp. 45~53, 1978.
- 4) 日野幹雄: モンテ・カルロ法による乱流拡散の二, 三の計算について, 第 9 回水理講演会講演集, pp. 67~72, 1965.
- 5) 井上栄一: 地表風の構造, 農業技術研究所報告, A (物理・統計), 第 2 号, 1952.
- 6) Bullin, J.A. and A.E. Dukler: Stochastic Modeling of Turbulent Diffusion with Hybrid Computer, Envir. Sci. & Tech., Vol. 8, No. 2, pp. 156~165, 1974.
- 7) 砂原善文: 確率システム理論, 情報とシステムシリーズ, 電子通信学会, 1979.
- 8) Itô, K.: Lectures on Stochastic Processes, Tata Inst. of Fundamental Research, Bombay, India, 1961.
- 9) Hay, J.S. and F. Pasquill: Diffusion from a Continuous Source in the Relation to the Spectrum and Scale of Turbulence, Adv. in Geophy., Vol. 6, Aca-

- demic Press, 1959.
- 10) Taylor, G.I. : Diffusion by Continuous Movements, Proc. Lond. Math. Soc. Ser. 2, Vol. XX, pp. 196~212, 1921.
 - 11) 得丸英勝ほか : 計数・測定=ランダムデータ処理の理論と応用, 工学基礎講座 18, 培風館, 1982.
 - 12) 赤池弘次 : 情報量規準とは何か—その意味と将来への展望, 数理科学, No. 153, pp. 5~11, 1976.
 - 13) 平岡正勝・古市 徹・北田敏広 : 大気拡散式の概観, 空気が清浄, Vol. 15, No. 6, pp. 2~10, 1977.
 - 14) Seinfeld, J.H. : Air Pollution—Physical and Chemical Fundamentals, McGraw-Hill, 1975.
 - 15) Kraichnan, R.H. : Diffusion by a random velocity field, Physics of Fluids, Vol. 13, No. 1, pp. 22~31, 1970.
 - 16) 日野幹雄・池田信己・伊藤雄二 : 乱流拡散における Lagrange 相関と Euler 相関, 第 20 回水理講演会講演集, pp. 127~132, 1976.

(1982.9.22・受付)
