

光化学大気汚染三次元モデルの感度解析

国立公害研究所 ○若松伸司、鶴野伊津志
 米国EPA大気科学研究所 Kenneth L. Schere
 イリノイ大学 Richard A. Waddden

1. はじめに

自動車や工場事業所等から排出された窒素酸化物 (NO_x) や炭化水素 (HC) は環境大気中において太陽の紫外線を受け光化学反応を起こしその結果オゾン (O_3) 等の二次生成物質が生成する。 NO_x や HC 等の原因物質の大きさと O_3 濃度との間には一定の比例関係が無く、その時その時の発生源からの NO_x と HC の濃度比や、境界条件により大きく異なった挙動を示す。これは O_3 が複雑な化学反応の結果生成することによるものである。またこの光化学二次生成物質は気象条件によっては長時間にわたり同じ場所に滞留したり、長距離にわたって輸送されたりするためその動態は極めて複雑である。このような O_3 と NO_x 、HC の関係を正しく把握するためには物理・化学過程を正しく取り込んだ光化学大気汚染三次元モデルの利用が必要となる。一般的にモデルは移流・拡散を数値的に解くメインの部分と、気流の立体分布、拡散係数、化学反応、発生源からの NO_x 、HC 排出量を予測するサブモデルから構成される。モデルの確立にあたってはモデルに含まれるこれらの部分 (モジュール) が正しく機能しているか否か、その予測の精度と誤差にモジュール間で極端な違いはないか等々を実験データや観測データをもとにして検証しておく必要がある。このようにして組み立てられたモデルはその利用に先立って各種の感度解析がなされる。すなわち入力情報の不確定性がモデルの計算結果に及ぼす影響の程度を知っておくことがモデルの利用にあたって最も重要である。本研究においては初期条件、境界条件及び、発生源組成分布が計算結果に及ぼす影響を明らかにする。

2. 三次元モデルによる解析

今回使用したモデルは米国SAI社がEPAの要請により開発した三次元オイラーモデルを基本としている。計算は1981年7月に関東地方において気象の立体分布と大気汚染物質の航空機観測を行った時のデータを用いて実行した。フィールド観測が行われた16日と17日にかけて関東地域において高濃度の光化学大気汚染が出現した。この間の平均風速は2m/s程度と弱風であり、海陸風循環が発達し極めて複雑な気流場が構成されていた。観測期間中には23地点において毎時刻の上層風が観測されており、4地点では気温の垂直分布が求められたため、モデル計算において最も重要な風の立体分布並びに混合層の時刻変化はこれらの実測データを利用した。

モデル計算の領域は図1に示した東西183km、南北172kmの範囲であり約6kmの正方形メッシュを用いた。垂直方向には5層及び20層のグリッドを設定した。化学反応のスキームとしてはHCの炭素間の結合形態により(1)一重結合炭素原子(PAR)、(2)高反応性の二重結合炭素原子(OLE)、(3)低反応性の二重結合炭素原子(ETH)、(4)反応性のあるアロマティック環(ARO)、(5)カルボニル基(CARB)の5種に分類して取り扱うCBMスキームを利用した。一般に光化学反応に係る炭化水素成分の排出量は非メタン炭化水素(NMHC)総量として年間単位で推定されているにすぎないため計算を行うにあたってはそれぞれの発生源ごとにこれら5種類の炭化水素組成分布、並びにその時刻変化を求めなければならない。今回の計算では炭化水素の主成発生源である自動車排出ガス、ガソリン蒸発、石油精製、塗料・溶剤、石油化学プラントからの5種の発生源について日本とアメリカの実測データ等をもとに表1に示すような2種類の組成分布表を作成し利用した。

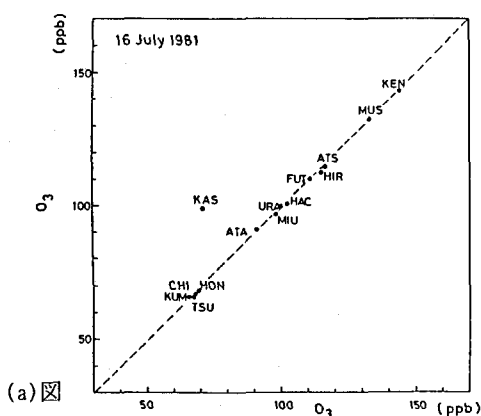
Component	Weight %				
	Vehicle Exhaust	Gasoline Vapor	Petroleum Refinery	Paint Solvents	Petro-chemical
Ethane	3.1	0.0	3.0	0.0	3.0
Ethylene	12.0	0.0	2.9	0.0	50.0
Acetylene	5.5	0.0	1.6	0.0	1.8
Propane	0.1	1.8	20.2	0.0	4.3
Propylene	5.6	0.0	2.8	0.0	3.9
Isobutane	4.6	15.2	8.7	0.0	2.6
n-Butane	15.0	19.1	16.1	0.0	5.5
Isopentane	10.4	35.8	14.4	0.0	4.0
n-Pentane	8.0	13.1	6.9	0.0	2.8
2-Methylpentane	3.8	6.3	3.7	0.0	1.5
3-Methylpentane	2.3	3.1	2.1	0.0	1.1
n-Hexane	4.4	3.2	5.0	0.0	4.3
Benzene	5.6	0.9	4.3	0.0	3.4
Toluene	10.5	1.0	7.1	25.7	7.7
Ethylbenzene	1.0	0.1	1.0	32.5	1.6
p,m-Xylene	2.4	0.3	1.3	30.3	1.4
o-Xylene	1.1	0.1	0.9	11.5	1.1
	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0

(a)主に日本におけるデータを用いた推定値

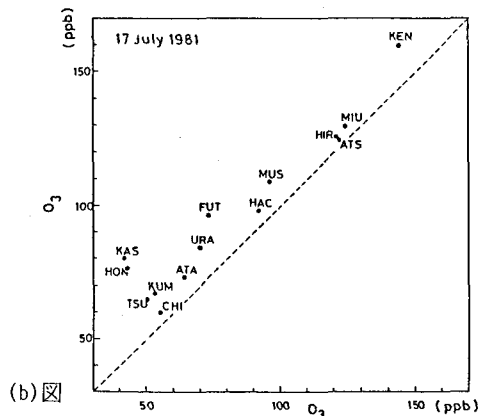
Component	Weight %				
	Vehicle Exhaust	Gasoline Vapor	Petroleum Refinery	Paint Solvents	Petro-chemical
Ethane	3.1	0.1	4.8	0.0	3.0
Ethylene	18.2	0.0	0.7	0.0	50.0
Acetylene	7.8	0.0	0.1	0.0	1.8
Propane	6.7	1.7	21.3	0.0	4.3
Propylene	3.2	0.0	0.8	0.0	3.9
Isobutane	1.2	18.4	4.7	0.0	2.6
n-Butane	9.0	41.7	17.6	0.0	5.5
Isopentane	7.2	20.2	16.9	0.0	4.0
n-Pentane	3.2	8.5	7.3	0.0	2.8
2-Methylpentane	3.5	3.1	8.3	1.0	1.5
3-Methylpentane	2.3	1.6	5.0	1.0	1.1
n-Hexane	1.4	1.1	3.8	1.8	4.3
Benzene	6.6	1.3	1.4	0.0	3.4
Toluene	14.1	1.3	4.6	67.4	7.7
Ethylbenzene	2.0	0.4	0.6	6.2	1.6
p,m-Xylene	6.6	0.4	1.5	17.1	1.4
o-Xylene	3.9	0.2	0.8	5.5	1.1
	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0

(b)主にアメリカにおけるデータを用いた推定値

表1 炭化水素成分の発生源組成分布

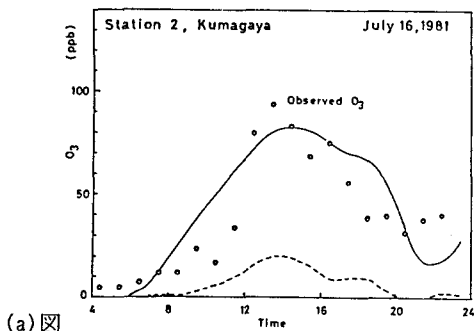


(a) 図

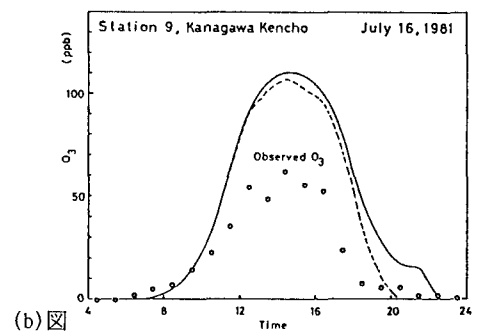


(b) 図

図2 5層モデルを用いて得られた14地点(図1に示す)における最下層メッシュの日最高O₃濃度。縦軸は境界条件として実測データを利用した場合の計算結果で、横軸は実測値の1/10を境界条件として用いた場合のそれぞれの1989年7月16日((a)図)、及び7月17日((b)図)における計算結果を示す。



(a) 図



(b) 図

図3 20層モデルを用いて得られた熊谷((a)図)及び神奈川県庁((b)図)の最下層メッシュ(100m)におけるO₃濃度変化。図中の○印は実測値、実線は実測の境界濃度を境界条件として用いた場合の計算結果、破線は境界条件を全濃度ゼロとした場合の計算結果である。