

大気環境シミュレーション・モデルの現状

～コンピュータの発達とシミュレーション技術の進歩～

岡本 真一*

大気環境のシミュレーションのための数学モデルに関する最近の研究について概観した。大気中での大気汚染物質の物理的・化学的プロセスの解明には詳細な観測データのみならず、大容量、高速のコンピュータが不可欠であり、その発展はコンピュータ利用技術の進歩に負う所が大きい。しかし、今日でも、このような計算機の性能が研究上の最大の制約条件となっていることなどを考察する。

1. 緒言

大気中へ人為的に添加される物質で私たちにとって好ましくないものを大気汚染物質と呼んでいる。このような成分による大気環境の汚染を予測するためには、風洞や水槽を用いた模型実験が行われることもあるが、多くの場合はコンピュータを用いたシミュレーション計算が行われる。

大気中での大気汚染物質の挙動は移流拡散の微分方程式により記述される。また、大気汚染物質間の反応については化学反応式により表すことができる。大気汚染物質が拡散してゆく“場”が比較的単純な場合には、ある程度簡略化された条件下で微分方程式を解析的に解いて得られた数式により大気汚染物質の濃度が計算できる。しかし、複雑な化学反応を伴う大気汚染物質の挙動の解析や気象条件が複雑に変化している中での煙の拡散を表現するためには、このような近似解の適用は困難なため、元の微分方程式を数値的に解くことになる。このような方法はコンピュータの発達と密接な関係にあ

り、大容量・高速のコンピュータの出現によって、始めて可能になった技術であるといえる。ここでは、このような数値計算による大気環境の予測手法について考えてみよう。

2. 大気環境シミュレーションのための数式モデル

大気中で、風に流され、拡散してゆく煙（粒子またはガス状の分子）の挙動は移流拡散の微分方程式により記述される。そして、一定の空間内で、一定の時間平均をとった大気汚染物質の濃度の分布については、「大気汚染物質の単位時間当たり、単位断面積当たりの輸送量（フラックス）は濃度勾配に比例する。」との仮定を採用することによって、式(1)に示す微分方程式で表現できる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial x} - v \frac{\partial C}{\partial y} - w \frac{\partial C}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (1)$$

* 東京情報大学教授

ここで、 C は濃度、 u, v, w は風速の x, y, z 成分、 K_x, K_y, K_z はそれぞれの方向の拡散係数である。

この式(1)において、風速成分および拡散係数の空間分布が一定（あるいは非常に簡単な関数、例えば高度のべき乗に比例する、等で表現できる）であれば、この微分方程式は解析的に解くことができ、正規型ブルーム式やパフ式、あるいは坂上式などの種々の解析解が得られる。

一方、このような風速や拡散係数の分布が複雑な場合、さらに空間の中で生成や消滅の項が含まれる場合には、この式(1)を解析的に解くことはできない。このような場合には、式(1)を差分法や有限要素法などを用いて数値的に解く方法があり、これらの数値シミュレーションのための数式モデルを数値解法の拡散モデルと呼んでいる。

このような数式モデルは空間的な濃度分布の記述方法、すなわち空間分布についての簡略化の度合いによって4種類に分類できる。これらの各方法の概要を次に示す。

2. 1 0次元モデル

室内の大気汚染や都市内の大気汚染を考える場合、対象空間内の濃度分布が均一であると仮定できれば、濃度の時間変化は汚染物質の増減による収支に基づいて計算できる。すなわち、濃度 C の時間変化は

$$\frac{dC}{dt} = Q + R_1 - R_2 - D \quad (2)$$

で表わされる。ここで、 Q は（発生量/体積）で計算される濃度増加分、 R_1, R_2 は大気中での反応による生成量と消滅量による濃度変化量、 D は沈着による濃度減少分である。この式(2)に示されるような常微分方程式系のモデル式を適当な差分近似により数値的に解く方法を0次元モデルと呼ぶことにする。

2. 2 1次元モデル

細い空間の中の長手方向の濃度分布を表現する場合、例えば河川水の汚濁について下流方向への拡散を記述する場合には、汚染物質が流れてゆく方向（この方向を x 軸方向とする）への移流拡散のみに注目すればよい。このような場合の拡散モデルは1次元で表現される。

$$\frac{\partial C}{\partial x} = -u \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial C}{\partial x} \right) + Q' \quad (3)$$

ここで、 u は風速、 K は拡散係数、 Q' は発生、反応、沈着などによる濃度変化量である。

3次元の空間的な広がりを持つ汚染物質の分布について、何らかの条件によって、1次元で近似できる場合もある。例えば、水平方向に均一な条件が続いている場合（平坦な広い草原や砂漠、海洋上など）、地表近くでの汚染物質の輸送を考えれば、水平方向の濃度分布の変化は無視することが可能であり、 z 方向（鉛直方向）のみを対象とすればよい。また、地表近くで放出されたフロンガスが成層圏へ輸送される過程のモデル化においては、水平方向の移流は鉛直方向の輸送よりも著しく大きいので、第一次近似として、水平方向の濃度分布は均一であるとみなして、1次元（ z 方向のみ）の拡散モデルで扱う場合もある。

さらに、図1に示すように風に流されて移動する気塊（air mass）の中で鉛直方向の拡散を扱うモデルもある。なお、このようなモデルは流跡線（trajectory model）とも呼ばれている。

2. 3 2次元モデル

発生源の状態や汚染物質が拡散する空間に対する外部的な制約条件、あるいは気象パラメータの空間的な広がりに関する条件などの理由によって、3次元の濃度分布を2次元の現象として近似的に表現できる場合もある。

実際の大気環境のモデル化の際に多く用いられ

る事例としては、次のような例を挙げることができる。

- ① 道路の両側の建物や遮音壁などの状態に関して、同じ状況が十分に長く続く場合、道路に対して直角に風が吹いていれば、風下方向 (x 軸) と鉛直方向 (z 軸) の断面内での移流拡散を表現すればよい。例えば、建物に周囲を囲まれた道路 (ストリート・キャニオン) 内での循環風による自動車排出ガスの拡散を扱う場合など。
- ② 比較的に低い高度 (100~数百mの高度) に逆転層 (安定な大気の層) があり、その下層の大気が不安定な場合、上層の逆転層の底面 (リッド) 高度までの一様混合が仮定できる。この

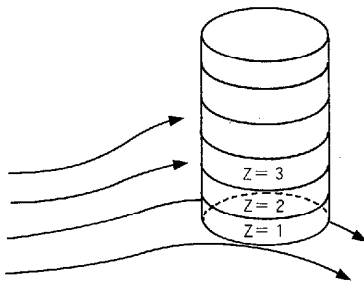


図1 流跡線モデル (ラグランジュ・モデル) の概要

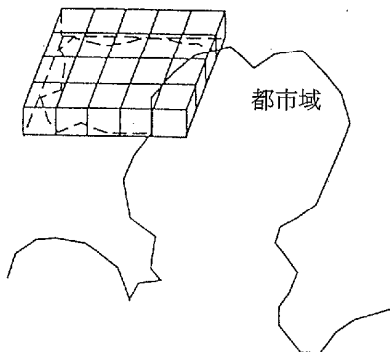


図2 1層ボックスモデル (2次元モデル) の概要

ような場合の都市 (あるいは地域) の大気環境モデルは水平方向 (x 方向と y 方向) の2次元のモデルで表現できる。例えば、逆転層高度の低いロサンゼルスでは、CIT モデル (McRae *et al.* 1982) など初期にこのようなモデルが多く利用された (図2参照)。

- ③ 対流圏から成層圏までの大気中での各種汚染物質の移流拡散や化学反応を計算する場合、経度方向 (東西方向) では短期間に一様に混合されるので、その濃度変化を考えない (すなわち、経度方向の濃度の代表値で表現する) とすれば、図3に示すような子午線上での鉛直断面のみを考慮すればよい。したがって、このタイプの大気環境モデルでは、緯度 ϕ 、高度 z での経度線方向積分平均濃度 C は次式で表現される (Gidel *et al.*, 1983)。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F_z}{\partial z} - \frac{1}{a \cos \phi} \times \frac{\partial}{\partial \phi} (F_y \cos \phi) + P(C) \quad (4)$$

ここで、 F_y は北向きのフラックス (物質輸送量)、 F_z は上向きのフラックスであり、 a は地球

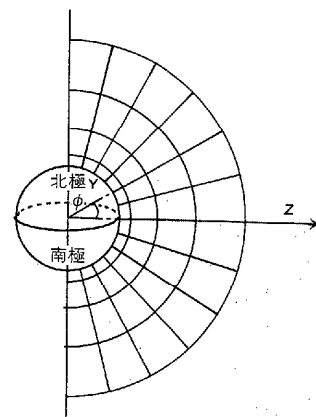


図3 全球スケール (地球規模) の2次元モデルの概要

の半径、 $P(C)$ は化学反応項である。

2. 4 3次元モデル

大気中での汚染物質の拡散現象は3次元の広がりを持っており、より正確なシミュレーションを実施するためには、式(1)に示される3次元の移流拡散方程式を適切に離散化して、数値的に解くことになる。この3次元の数値解法による大気環境モデルは対象とする現象のスケールに応じて、重要な項と簡略化が可能な項などの相違があるため、具体的な適用区分ごとにそれぞれ異なる扱いが求められることもある。

3次元空間での大気汚染濃度の分布を計算するには、多くの場合、大気空間を格子状に区切り、区切られた微小空間（セルと呼ぶこともある）の中心での濃度またはそのセル内の代表濃度を求めることになる。このモデル化では、計算量が非常に多くなるため、種々の工夫が必要であり、これについては次節以降で述べる。このようなモデルは、一般に格子モデル（Gridモデル）あるいはオイラーモデル（Eulerモデル）と呼ばれている（図4参照）。

この格子モデルでは、計算量が余りに多くなるので、風によって流される空気塊の中における汚染物質の収支に基づいて濃度を計算する方法がある（図1参照）。このモデルでは、図1のように、多層の空気塊の中での鉛直拡散を考慮

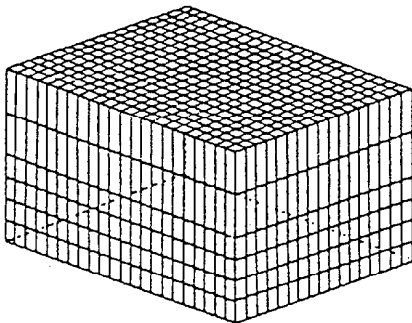


図4 格子モデル（オイラー・モデル）の概要

するものと、単一の気塊内での完全混合を仮定するものがあるが、ともに流跡線モデル（Trajectoryモデル）あるいはラグランジュ（Lagrange）モデルと呼ばれており、これらのモデルでの空間濃度分布の扱いは0次元的あるいは1次元的である。最近における流跡線モデルの例としてはSimpson (1992)などがある。また、格子モデルの例としては、UAMモデル（Reynolds *et al.*, 1973）、CITモデル（McRae *et al.*, 1982）などがある。流跡線モデルと格子モデルについての長所、短所をまとめた結果を、表1に示す。

3. 数値解法による大気環境モデルの特徴と限界

3. 1 適用範囲

数値解法による大気環境モデルでは、正規型ブルーム式を導出する際の制約条件（例えば風や拡散係数は時間的、空間的に変化してはいけない、等）から解放されるので、その適用可能範囲は正規型ブルーム式による大気環境モデルよりは、はるかに広い。したがって、正規型ブルーム式が適用できないような状況下において、その価値が発揮されることになる。具体的には、とくに下記の2項目が重要である。

① 大気中での化学反応による生成、消滅が重要である場合

光化学スモッグ、酸性雨の原因となる酸性微粒子のシミュレーション、など

② 山岳、建造物などにより、周囲の風の分布が大きく変化している場合

山岳地域、高層建築に囲まれた道路内でのシミュレーション、など

また、数千km風下までの汚染物質の長距離輸送、地球の回りを何周もする間に徐々に対流圏から成層圏へ輸送されるフロン等の地球規模の拡散シミュレーションにおいても、数値解法の大気環境モデルが利用されている。

数値解法の大気環境モデルは、このような複雑な大気汚染現象のモデル化に適した方法であるが、このような複雑なモデルの運用に際して

表1 流跡線モデルと格子モデルの比較

	流跡線モデル	格子モデル
長所	<p>特定地点での濃度計算では計算量が少ない。</p> <p>特定の流跡線のみでの計算では複雑な化学反応モデルを採用することができる。</p>	<p>メッシュ状の格子点での濃度計算では、流跡線モデルより計算量が少なくなることもある。</p> <p>3次元の分布をもつ風向風速、拡散係数などのパラメータを考慮できる。</p>
短所	<p>流跡線の近接地域及び境界線上の発生源の扱いが難しい。</p> <p>地表近くと上層での風向風速が異なると流跡線の計算が困難になる。</p> <p>水平方向の拡散は一般には考慮できない。</p>	<p>採用する差分法によっては数値計算上の擬似拡散を生ずることがある。</p> <p>一般に計算量が多い。</p> <p>格子間隔より小さいスケールの濃度変化は表現できない。</p>

は、それだけ多くの情報も必要となる。例えば、3次元差分モデルであれば、すべての格子点における風速成分 (u, v, w) と拡散係数 (K_x, K_y, K_z) が必要である。そして、これらの気象パラメータを内外挿により推定するための十分な量の気象観測データ、あるいはこれらの諸量を計算によって求められるような十分に正確な気象モデルのいずれか一方または両方が利用できることが、正確な大気環境シミュレーションを実施する上での必須事項である。

もし、このような条件が満たされなければ、複雑で計算時間の長くなる3次元数値解モデルを使用しても、より簡便な正規型ブルーム式による拡散モデルと変わらないシミュレーション結果しか得られないことになる。そして、現実問題としては、正規型ブルーム式のモデルでは実測濃度分布に合わせるためには、どのパラメータをどのように変えればよいか比較的容易にわかる。しかし、3次元数値解モデルでは、このようなモデル及びモデル中のパラメータの特性を十分に理解することが困難なために、実測濃度分布に計算結果が合うように調整する作業が難しい。このため実測値と計算値との定量

的な評価においては正規型ブルーム式のモデルよりも劣る性能しか得られないこともある。

3. 2 時間分解能と平均化時間

一般的な正規型ブルーム式のモデルであれば、水平方向拡散幅 σ_y は平均化時間によって大きくなることはよく知られており、そのような知見に基づくモデリングも実施されている。それでは、多くの数値解法を利用した大気環境モデルでは、この点をどのように扱っているのだろうか。最近までに発表された大部分の数値解モデルにおいて、このような問題は無視されているといっても、過言ではない。

正規型ブルーム式のモデルであれば、煙源近傍では σ_y は時間に比例して増大し、遠方では輸送時間の1/2乗に比例して煙が広がるというモデルも採用できる。しかし、このような現象も数値解モデルで厳密に扱うのは難しい場合もある。数値解モデルでは、離散化の手法によって種々のモデルがあり、平均化時間など時間スケールの問題に対する対応の難易度にも差がある。一般的な差分近似解法では、空間ごとに一

定の拡散係数を与えることが多いので、個々の煙源ごとに風下距離によって拡散係数が変化するような現象のモデル化は難しい。一方、粒子モデルでは、個々の粒子にその軌跡に沿う移動距離などの情報を付加することが可能であり、Taylorの統計理論を再現するようなシミュレーションも不可能ではない。しかし、大気中での化学反応を伴う汚染物質や面的に分布している発生源に対するシミュレーションでは、このような乱流パラメータの設定は困難である。

一般的に、数値解法による大気拡散のモデルでは、各格子点での風速成分を実測データからの内外挿あるいは気象モデルの出力(計算結果)に基づいて設定している。そして、多くの場合、このような気象条件(風の場合)の推定には、気象台、測候所、あるいは大気汚染測定局において観測されている正時前10分間の平均風向風速データが用いられている。すなわち、運動方程式のモデルであれば境界条件の設定等に、変分法のモデルであれば内外挿の基準データとして、このような10分間平均のデータが利用されている。一方、大気汚染濃度は正時前後の吸収液交換等のタイム・ロスを見れば、ほぼ1時間の平均濃度が計測されており、シミュレーション・モデルでの計算対象もこの1時間平均値であることが多い。しかし、このような場合でも、シミュレーション計算における入力条件としての風のデータは正時前10分間の平均値であることが多く、濃度計算値との間に矛盾が生じている。すなわち、風の変動としては10分間までの周期を考慮して、濃度の拡散幅としては1時間値を求めていることになるので、プルーム軸上の濃度を過大評価することになる。また、風向が傾向(トレンド)をもって変化している場合には、濃度分布自体の不一致の程度も大きくなり、好ましいことではない。

このような問題を考慮すれば、大気汚染との関連に主眼を置いた気象観測では正時前10分間の風向風速のみを求めるのは不適切であり、早急に1時間平均値が得られるように改正されるべきであろう。しかし、現実には、このような

データしか得られないことが多いので、シミュレーションの際には注意を要する。例えば、シミュレーション対象時刻の前後の正時前10分間平均のデータより時間方向へ風向風速のデータを補間して、時間差分 Δt ごとのすべての時刻での風を推定することは予測精度の向上に対して非常に有効である。そして、このような例は岡本、ほか(1991)などにみることができる。

4. 数値解法による大気環境モデルの発展

4.1 大気環境シミュレーションの歴史

大気環境のシミュレーションに種々の数値解法のモデルが応用されるようになったのは1960年代の後半以降であり、これは電子計算機の発達と軌を一にしてきた(表2参照)。差分式などの数値解法のモデルでは正規型プルーム式の導出時に必要となる種々の制約条件から解放されるため、地形の起伏が大きく風向風速の変化がある場合や、大気中での対象物質の生成消滅などがある場合にも適用できる。このため、1960年代の後半には、Hino(1968)など風系推定モデルと組み合わせて複雑地形上の大気汚染濃度を予測するモデルが開発された。このHino(1968)のモデルは煙突の風下にある山岳地帯の影響を数値計算によって、解析しようとするものであり、現在、多方面で検討されている風洞による排煙拡散シミュレーションのコンピュータへの置換の可能性を示唆した画期的な成果であるといえよう。

初期の風系推定モデルでは「連続の式」を用いたものが多いが、後に「連続の式」と「運動方程式(ナビエ・ストークス式)」を連立させたモデル、実測データの補間値を初期値として「連続の式」を制約条件として変分法で風系を推定するモデルなども提案されている。

その後、アメリカ、日本などでは光化学反応を伴う大気汚染の濃度予測を目的として数値解モデルが積極的に研究され、数値解法による大気環境モデルの発展に大きく貢献した。とくにアメリカ環境保護庁(EPA)の委託によりSys-

表2 電子計算機の進歩と大気環境モデル開発の歴史

年	使用計算機	数値解モデルによる大気環境シミュレーションの発展
1964年		◎ Turnerによるナッシュビルでのシミュレーション (正規型ブルームモデル)
68年	IBM7090	日野による複雑地形上のシミュレーション
69年		◎ 米国EPAの委託によりSystems Applications Inc.で光化学大気モデルの開発に着手 (79年まで継続、後のUAMモデル)
71年	CDC7600	ローレンス・リバモア研究所のボックスモデルによるサンフランシスコ地域のシミュレーション (MacCranken <i>et al.</i> , 1971)
73年	IBM360/65	UAMモデルによるセントルイスでの光化学スモッグのシミュレーション (Reynolds <i>et al.</i> , 1973)
73年	IBM360/195	IBMモデルによるセントルイスでのシミュレーション (Shir & Shieh, 1974)
81年		◎ アメリカとカナダの酸性雨対策の交渉のベースとして流跡線モデルではなく、3次元格子モデルを使用することで合意
80-82年		◎ 米国DOEによるASCOT計画で複雑地形上の数値解モデルの研究が進められた
86年		◎ 米国EPAの指針モデルに始めて数値解モデルが登録された (UAM)
86年		◎ 計算機の“Grand Challenge”に対応する総合的大気環境モデルの開発
87年		STEM-II (Carmichael <i>et al.</i> , 1986)
87年		RADM (Chang <i>et al.</i> , 1987)
88年		ADOM (Venkatram <i>et al.</i> , 1988)
92年	Allian FX/8	◎ 並列プロセッサに対応した大気環境モデルの開発
93年	IBM3090-600J	STEM-IIモデル (並列化) (Shim <i>et al.</i> , 1992)
93年		STEM-IIモデル (並列化) (Saylor <i>et al.</i> , 1993)
94年	Cray X-MP Delta	CITモデル (並列化) (Dabdub <i>et al.</i> , 1994)

表3 数値解法による大気環境モデルについての開発の経緯 (主としてアメリカについて)

年代	代表的なモデル	特徴
1960年代	Hino (1968)	・数値解モデルの実用化についての可能性の検討、研究室段階での検討
1970年代	Roth <i>et al.</i> (1971) および Reynolds <i>et al.</i> (1973) によるSAIモデル Shir and Shieh (1974) によるIBMモデル	・実用モデルを指向したモデル開発 ・民間研究機関、ソフトウェア会社主導の研究開発 ・ユーザーマニュアル (モデル利用の手引き) の提供、ソースコードの公開
1980年代	UAM (表5参照) RADM (表5参照) FEM3 (表5参照)	・新しい利用分野の拡大 (複雑地形、酸性雨、全球モデルなど) ・新しい数値計算法の開発普及に対応したモデル開発
1990年代	UAM (new version) CALGRID MODEL3	・個人研究レベルを超えており、組織的なモデル開発が必要 ・ユーザー指向のモデル開発 (使い易いモデル) ・計算機の性能 (ベクトル演算、並列プロセッサ等) との整合と他システムとの互換性の向上

tems Applications Inc. (SAI) が開発した光化学大気汚染モデルは Roth *et al.* (1971)、Reynolds *et al.* (1973) により紹介され、その後EPAによる内部での評価作業が始まるまでの約10年にわたって研究が継続されている。

このモデルは1986年に発表されたEPAの指針において推奨モデルとして採用されているが、現在も適用範囲の拡大(海上発生源を含む広域モデルとして、etc.)や光化学反応機構、数値計算法等についての改良が続けられている。

ここで、数値解法による大気環境モデルの発展の経過を10年間隔程度に区切ってみると、表3に示すような特徴があることがわかる。

この中で数値解法による大気環境モデルの実用性と安定した高い予測性能を始めて実証したのはShir and Shieh (1974)のIBMモデルである。このIBMモデルでは、St Louis市域におけるSO₂濃度を1ヶ月間にわたって連続的にシミュレーション計算で求めたものである。移流項の差分スキームは2次の風上片側差分であり、まだ洗練されたものではないが、数値解法による大気環境モデルの将来の方向を示したものであったといえよう。さらに、このIBMモデルについての報告では、単に濃度分布のパターンが合っているという定性的な評価のみではなく、実測値と計算値の比較に統計的な評価を導入して、定量的にシミュレーション結果の評価を行っていることも注目される。そして、その結果は一般的な正規型ブルーム式によるモデルでのそれを凌駕するものであった。

また、地熱発電所から漏出する硫化水素の環境アセスメントの際に必要な山岳地帯で夜間に発生する斜面下降流(ドレネージ流)中での拡散に対する知識を得るために、米国エネルギー省(DOE)はASCOT計画(Atmospheric Studies in Complex Terrain)と言う大規模な環境調査を実施した。この複雑地形上での大気汚染物質の拡散を扱ったDOEのASCOT計画もこのような数値解法の大気環境モデルの発展に大きく貢献した。

その後、1980年代に入ると酸性雨の原因とな

る酸性微粒子やオゾン層破壊の原因物質(フロン等)の広域~地球規模(全球スケール)でのシミュレーションに数値解法の大気環境モデルが利用されるようになる。このような長期間の連続シミュレーションでは、質量保存性の良い数値計算法(計算スキーム)の採用が特に重要である。また、化学反応項を含む移流拡散方程式のモデルでは、計算スキームによる「負の濃度計算値の出現」に対しても十分な注意が必要であり、差分式による離散化によって生ずる擬似拡散の問題など、数値計算法に関する研究が積極的に行われたのも、この時期である。

とくに、アメリカとカナダとの酸性雨原因物質(SO₂)排出規制に関する交渉では、規制の根拠となるSO₂排出と酸性降水との因果関係の解明のために利用するシミュレーション・モデルとしては、簡便な流跡線モデルではなく、3次元数値解モデルを採用することで合意している(Hansen *et al.*, 1988)。これに基づいて、アメリカではRADM、カナダではADOMが開発されることになり、これらのシミュレーション・モデルの開発とその検証に莫大な研究費が投入されることになる。さらに、最近では光化学スモッグや酸性雨の予測に用いられる3次元格子(オイラー)モデル全体の検証を目的とした大規模な大気環境プロジェクトも実施されている。この一例としてはHansen *et al.* (1988)に紹介されているEMEFsプロジェクト(Eulerian Model Evaluation Field Study)などがある。

4. 2 コンピュータの進歩と大気環境モデル

前にも述べたように大気環境のシミュレーションはコンピュータの進歩とともに発展してきている。そして、Levin (1989)によって紹介されたコンピュータ科学の限界に挑戦する「グランド・チャレンジ」に関する項目の一つとして、このような大気環境のシミュレーションも取り上げられている。とくに大気乱流による大気汚染物質の詳細な挙動のモデル化、寿命の極端に

短い化学成分を含めた反応系のモデル化、エアロゾルの凝集・成長過程も含めた粒子状物質のモデル化などに関しては、常にコンピュータの性能が最大の制約条件となっている。

例えば、大気中での細かい渦による乱流拡散現象のモデル化に際して、拡散係数などのパラメータやクロージャー法などの便宜的な方法を使用せずに、すべての細かい渦に対しても流体の運動方程式であるナビエ・ストークス式を当てはめるとすれば、1 km³の立方体の大気空間での空気の動き(風)を記述するためには10¹⁸個程度の格子点を設定する必要があり、現存のいかなるコンピュータを使用しても、実用的な時間内に解を求めることは不可能である(Mikkelsen, 1995)。

科学技術用大型コンピュータの進歩の歴史は図5に示すように、1960年代前半のCDC6600の開発に始まり、今日まで、ほぼ5年で10倍の性能向上のスピードで進歩してきている。

1970年代前半には演算パイプライン方式のベクトル型計算機が出現し、1976年にはCRAY-1が開発されており、このような計算機をスーパーコンピュータと呼ぶようになった。このよう

なベクトル計算機は、ベクトルや行列の計算などの定型的な計算処理に適している。その後、単一CPU(中央演算装置)のコンピュータでは性能の限界があり、複数のCPUを持つ並列(パラレル)コンピュータが出現することになる。この並列型コンピュータには複数のベクトル型演算装置を持つ形式と非常に多くの(1000台以上)スカラ演算装置を並置した形式の2通りがあり、前者のタイプとしてはCRAY-XMP、富士通VPP500など、後者のタイプにはGF-11、FPS-Tなどがある。また、並列コンピュータでは、命令(Instruction)の流れが単一か複数か、データ(Data)の流れが単一か複数かによって、SISD、SIMD、MISD、MIMD(S:単一、M:複数)の合計4ケースに分類される。さらに、並置されるCPUの数によって、共有記憶の設定にも難易度の差があり、CPUが1000台以上の超並列コンピュータでは分散記憶となることが多い。

Carmichael *et al.*(1989)はNASA Goddard研究所の大型コンピュータを使用して、移流拡散と化学反応を同時に考慮するモデルの計算について検討している。NASAの並列コンピュー

コンピュータ性能 (MFlops)

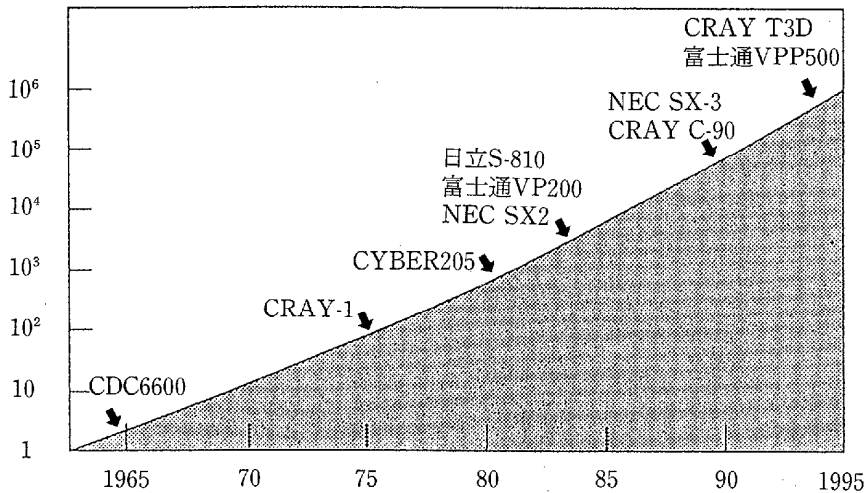


図5 コンピュータの計算性能の進歩

タはホスト機にVAX11/780、アレイ・ユニット (ARU) に128×128 (=16384個) の処理要素 (PE) を用いたGoodyear Aerospace社製のSIMD型コンピュータである。単一CPUのコンピュータによる一般的な化学反応を伴う大気環境シミュレーションでは、計算時間の90%以上は反応計算によるものであるが、反応計算にARU、移流計算にVAXを使用した場合には、表4に示すように、反応計算の処理時間を大幅に短縮できることを示している。

大規模な大気環境シミュレーションモデルの開発においては、このようなコンピュータのソフト及びハードについての最新の知見を理解することが不可欠である。Dabdub and Seinfeld (1994) によれば、大気環境シミュレーションにはMIMD方式の並列コンピュータが最も適していることを述べている。このDabdub *et al.* (1994) の報告では、CITモデルを各種コンピュータ及び各種の並列条件で計算しており、反応計算の並列化に比較して、移流項の並列化の方が難しいことなどを述べている。並列コンピュータでの計算処理時間は、単一プロセッサでの計算時間とプロセッサの数よりAmdahlの式を用いて見積もることができる。しかし、移流項の並列化の際には、プロセッサの数を2から256の範囲で増加しても、Amdahlの式により推定された予想計算時間よりも、実際の計算処理時間が長くなる傾向があることを報告している (Dabdub *et al.*, 1994)。

次に、最近の数値解法の大気環境モデルの中

で、比較的に新しい考え方が多く取り入れられている CALGRIDモデルと STEM-IIモデル最新版について、その概要をYamartino *et al.* (1992)、Saylor *et al.* (1993) より引用して、ここに紹介しよう。CALGRIDモデルは、カリフォルニア州の大気汚染防止計画のために開発された行政的なモデルであり、数値計算法、気象データ処理、光化学反応機構、ソフトウェア支援システムなどに最新の知見が利用されている。

CALGRIDはモデルドライバー・モジュールとこのモデルの管理下で運用される複数の科学モジュールから構成されている。ドライバー・モジュールはモデルの構成を決定する最も重要な部分であり、中央メモリーの割当、各科学モジュールで必要となるデータファイルの配分と管理、平均化時間処理、及び記憶領域などを決定する。科学モジュールの中には、汚染物質の輸送、拡散、化学反応及び沈着除去のプロセスに係わるものがあり、各モジュールごとに複雑さのレベルに応じて差し替えが容易にできるように設計されている。これらのモジュールはANSI77フォートランでプログラムされ、ベクトル演算も可能なように設計されているが、ベクトル演算機能の無い計算機にも対応している。CALGRID化学反応モデルは16K並列プロセッサを想定して、すべての格子点での同時化学反応計算処理を可能にするための対応が容易に実施できるようにも配慮されている。

CALGRIDドライバーモジュールでは時間積分による濃度計算を実施するが、この計算は全

表4 大気環境シミュレーションにおける水平輸送、鉛直輸送、化学反応の計算に要する計算時間の比率 (Carmichael, *et al.*, 1989より引用)

	CRAY-X/MP	MPP/VAX
水平輸送	2.9%	56.4%
鉛直輸送	2.1	39.7
化学反応	95.0	3.9

MPP : Massively Parallel Processor (16K unit)

体として演算子分割法 (Operator splitting) を採用している。移流計算にはChapeau関数ガラーキン法を使用しており、計算値の波動を除去するためにForesterフィルターを採用している。

STEM-II モデルはCarmichael *et al.* (1986) により提案された酸性雨及びオゾン等 2 次生成物質を対象とした総合大気環境モデルである。このモデルでは、汚染物質の移流・拡散、ガス相での化学反応、2 次粒子生成過程、水滴(雲)中での液相化学反応、沈着過程等を考慮している。移流・拡散のモデルでは、演算子分割法 (Operator splitting) を採用し、1 次元の移流拡散方程式を有限要素法により順次解いている。移流項の離散化には、ペトロフ・ガラーキン法を採用し、基底関数には 1 次式、重み関数としては非対象 2 次式を用いている。Saylor and Fernandes (1993) はケンタッキー大学計算センターの並列コンピュータに対応するための

STEM-II改訂版を発表している。このセンターのメインフレームは 6 台のベクトル・プロセッサをもつ IBM 3090-600J (最高827.6M Flops)である。STEM-IIの並列化(Parallelization) にはIBM Parallel FORTRANが使用され、FORTRAN類似のステートメントにより仮想プロセッサの数を指定できる。格子点数 2268個の計算領域での24時間分のシミュレーションに要する時間はウォールロック・タイムで約3500秒 (利用者が単独で指定した数のプロセッサを利用できた場合の経過時間) であるが、プロセッサの数を 2~5 と指定した場合は約 1780~750秒となっている。

5. 大気環境シミュレーションモデルでの数値解法

5. 1 移流項の計算

表5 最近における大気環境モデルと用いられている数値解法

モデル名称	出典	数値計算法
<光化学大気汚染モデル> UAM UAM(new version) CIT URM CALGRID	Reynolds <i>et al.</i> (1976) Yamartino <i>et al.</i> (1991)* McRae <i>et al.</i> (1982) Kumar <i>et al.</i> (1994) Yamartino <i>et al.</i> (1991)	SHASTA法 Smolarkiewiczの反復風上差分法 Chapeau関数ガラーキン法 SUPG (流線上ペトロフガラーキン法) Chapeau関数ガラーキン法
<複雑地形上の拡散モデル> ADPIC EGD	Lange (1983) Uliasz (1993)	粒子法 (PIC法) Chapeau関数ガラーキン法 Foresterフィルター付
<酸性雨モデル> RADM ADOM STEM-II	Chang <i>et al.</i> (1987) Yamartino <i>et al.</i> (1991)* Shim and Carmichael (1991)	Smolarkiewicz反復風上差分法 修正 3 次スプライン法 ペトロフ・ガラーキン法
<全球大気環境モデル> NASA-CTM (Chemical Tracer Model)	Prather <i>et al.</i> (1987)	Russell-Lernerの傾斜法 Pratherの 2 次モーメント法
<高密度ガス拡散モデル> ZEPHYR MARIAH-II FEM3	Havens <i>et al.</i> (1986)* Havens <i>et al.</i> (1986)* Chan <i>et al.</i> (1987)	PICK法 Crowley 2 次差分、FRAMフィルタ 修正ガラーキン有限要素法

* 印は間接的な引用による。

大気汚染物質の移流拡散を数値解法のシミュレーションモデルにより解析する場合、拡散項よりも移流項の離散化に多くの問題があることはよく知られている。今日までに、多くの差分近似解法他に有限要素法や各種のフラックス法などが移流方程式の離散化の方法として提案されている。このような移流方程式の数値解法についての紹介はRood(1987), Carmichael *et al.* (1979), 岡本(1993)などに示されている。

最近に発表された数値解法による大気環境モデルに利用されている数値計算法の概要を表5に示す。このような数値計算法についての研究を通じて、一般的な差分近似(例えば、1次風上片側差分など)は計算誤差が大きいため、近代的大気環境モデルでは使用されていない。そして、多くの場合には、行政的に利用される大気環境モデルでは、このような初歩的な計算スキームを採用しないことが学会での共通認識となっている。

このような移流拡散方程式の離散化に伴う計算誤差に関する研究は回転コーン問題として扱われることが多い(Chock and Dunker, 1983; Chock, 1985, 91; 堀内, 1987)。回転コーン問題とは、旋回流中において拡散項のない移流方程式を数値的に解いて、初期濃度分布がどの程度に保存されているかを見る数値計算スキームの評価方法である。岡本、ほか(1995)による検討結果を図6に示す。ここでは計算スキームとして、①差分法(2次精度の風上片側差分)、②3次スプライン法、③テーラー・ガラーキン法、④粒子法、を採用して、 33×33 の計算領域の中を最大クーラン数($\mu = u \Delta t / \Delta x$) $\mu = 0.4$ (ただし、①差分法のみ、数値計算上の誤差が大きいため0.2とした。)で2回転した後の濃度分布を示してあるが、差分法では数値計算上の誤差の累積によって、初期濃度分布のパターン形状がほとんど確認できないほどに変形していることがわかる。また、この計算の所要時間の比較を図7に示す。この結果より、計算精度、計算所要時間の両面から評価しても、テーラー・ガラーキン法が妥当であろう。そして、この評価

はChock(1991)の報告とも矛盾しないものであった。

5. 2 化学反応項の計算

光化学大気汚染や酸性雨など大気中での反応を伴う現象のモデル化では、大気汚染物質の移流拡散と化学反応の両者を同時に考慮することが必要になる。一般的な大気環境のモデルでは、濃度分布の地域的な分布を把握するための格子間隔に対応する時間差分は1~10²min程度であるが、反応速度の著しく速い化学成分の濃度を正確に求めるためには、これよりも短い時間差分が要求される。そのため、化学反応と移流拡散を記述するモデルを全体として演算子分割法(operator splitting)により解く方法がよく用いられる。

光化学大気汚染などの化学反応系モデルの数値計算法については、塩沢と岡本(1980)などにも紹介されているが、最近までは、Gear(1971)の方法がその主流を占めていた。しかし、最近における大規模な大気環境モデルでは、Gear法の使用を避ける傾向にある。例えば、UAMモデル、CITモデル、CALGRIDモデルなどが準定常状態近似法(Quasi-steady state approximation; QSSA法)を採用している。この選択は計算精度によるものではなく、計算所要時間の差によるものであると考えられる。

とくに、準定常状態近似法の中でも最近に多用されているのはHesstvedt *et al.* (1978)の方法である。この方法ではある化学種の濃度 C は生成項 P と消滅項 D により式(5)で示される。

$$\frac{dC}{dt} = P(C) - D(C) \times C \quad (5)$$

ここで、微小時間内で $P(C)$ と $D(C)$ が一定であれば、微小時間 Δt 後の濃度 C_{new} は式(6)で与えられる。

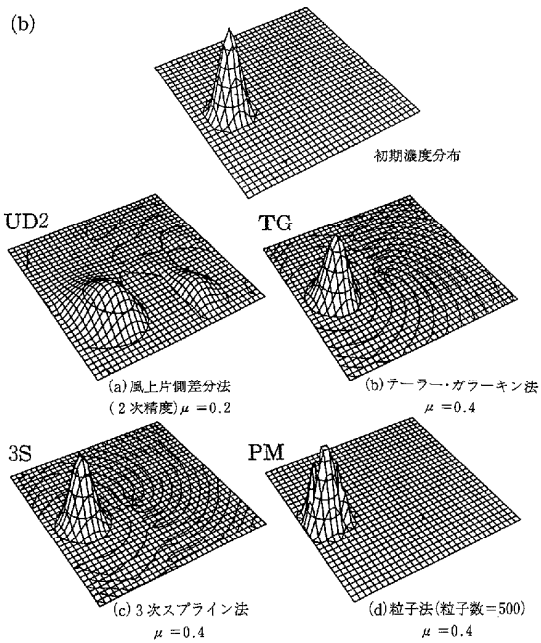
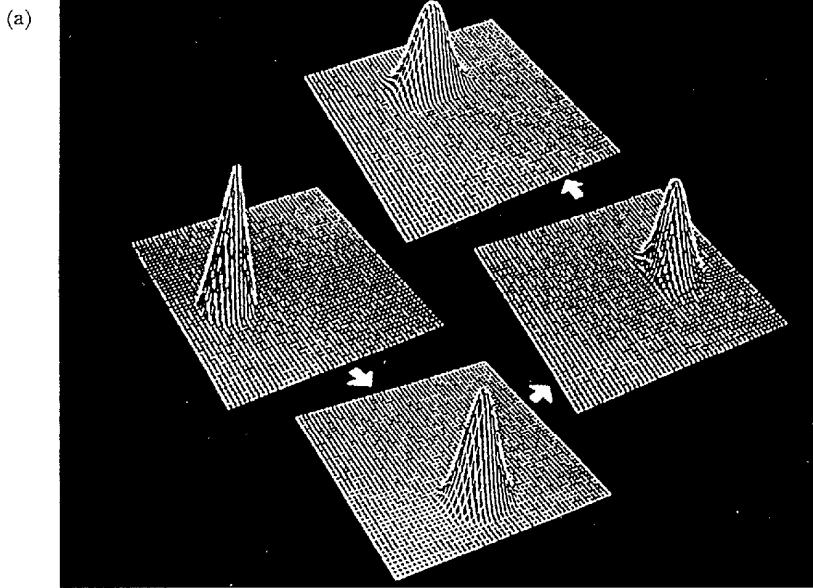


図6 回転コーン問題による移流方程式の離散化に伴う計算誤差の検討
 (a) 旋回流中での濃度分布の移動(回転コーン問題)の計算
 (b) 回転コーン問題(2回転後の濃度分布)による数値計算スキームの評価

$$C_{new} = \frac{P}{D} + \left(C - \frac{P}{D} \right) \exp(-D \Delta t)$$

ただし $D \neq 0$ (6)

この方法と同様の思想に基づく大気環境モデルは、すでにSklaew *et al.* (1972) のPICKモデルにも採用されているが、最近の報文での使用例としては、Simpson (1992) の光化学大気汚染モデル、Yamartino *et al.* (1992) の光化学大気汚染モデルCALGRID、Rasch *et al.* (1995) の3次元全球モデルなどがある。なお、Simpsonのモデルは流跡線モデルであるが、ヨーロッパ

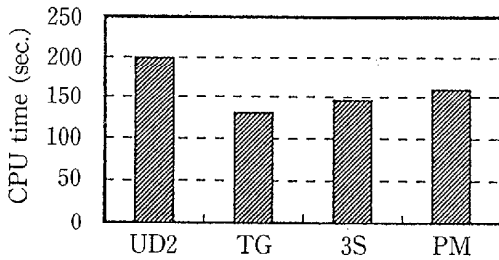


図7 回転コーン問題で2回転の計算に要する時間(主記憶16MB、公称20MIPSのワークステーション)

UD2：差分法，TG：テラー・ガラーキン法，3S：3次スプライン法，PM：粒子法

全体を37×39のメッシュでおおひ、全地点で1ヶ月間のシミュレーションを行っており、45化学種、100素反応式のモデルを時間差分 $\Delta t = 15$ 分で計算を行っている。その他の代表的な化学反応モデルを表6に示す。

そして、このような連立常微分方程式系モデルの汎用解析ソフトも開発されており、Gear法を応用して米国Lawrence Livermore国立研究所が開発したLSODE (Livermore solver for ordinary differential equations)はこの分野の解析ソフトとして定評があり、他の研究者が新たな計算スキームを提案する際のベンチマークとして、よく利用されている (Dabdub *et al.*, 1995)。

また、大気中での光化学反応モデルなど扱いの難しい(stiffな)連立常微分方程式系のモデルを要領よく解く方法をDunker (1986), Dabdub and Seinfeld (1995)などが提案している。

村尾、ほか (1994) はDunker (1986) の提案した感度法により全球モデルでのシミュレーションを行っている。この方法は、いくつかの代表的な計算条件について、微小時間 Δt 後の濃度 $C_{t+\Delta t}$ をGear法などで求めておき、時刻 t での各化学種の濃度、紫外線強度、温度、等の条件を λ_i として、 $\partial C / \partial \lambda_i$ などを計算し、この代表計算条件以外の条件での微小時間 Δt 後の濃度を $\partial C / \partial \lambda_i$ 等を利用して推定する方法である。この感度法はGear法に比較して、計算所要時間は約1/50と大幅な計算時間の短縮が可能であ

表6 光化学大気汚染モデルでの化学反応系のシミュレーション・モデル

大気環境モデル	出典	化学反応モデル	素反応式数	化学反応ソルバー
<光化学大気汚染モデル>				
CITモデル	McRae <i>et al.</i> (1982)	Fallのモデル	52	予測子修正子法
CITモデル	Harley <i>et al.</i> (1993)	Lurmannのモデル	107	
UAMモデル	Morris & Myers (1990)	CB-IV	87	conventional
NOAAモデル	McKeen <i>et al.</i> (1991)	Trainerのモデル	144	QSSA法
<酸性雨モデル>				
STEM-IIモデル	Shim & Carmichael (1991)	--	85	QSSA法
RADMモデル	Chang <i>et al.</i> (1987)	Stockwellのモデル	77	QSSA法
RADMモデル	Stockwell <i>et al.</i> (1990)	--	157	

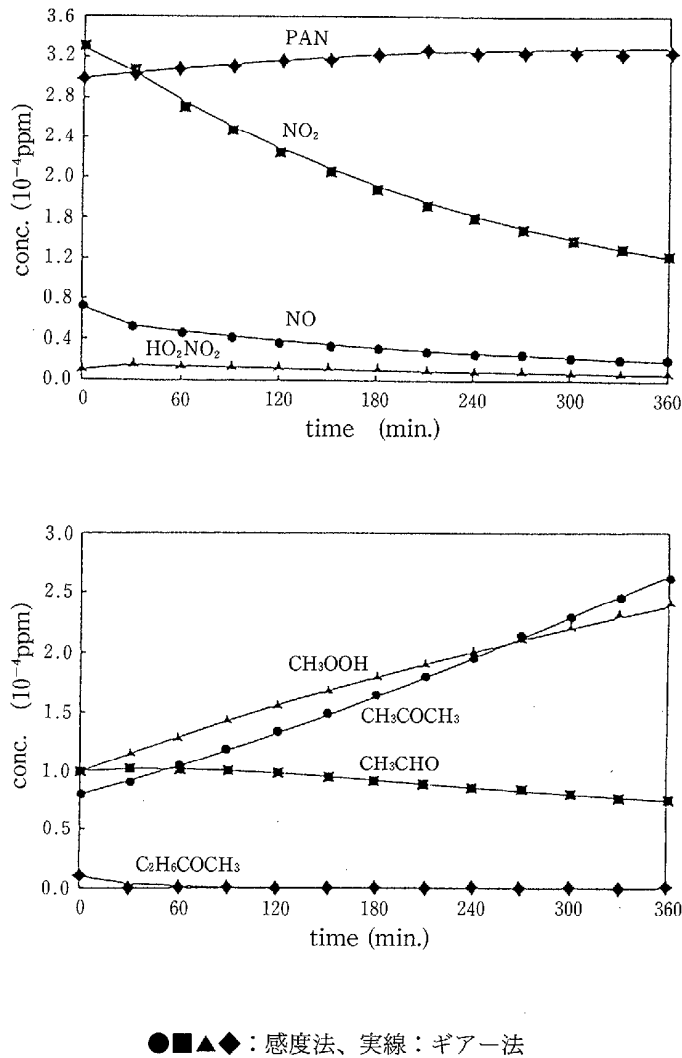


図 8 光化学スモッグ中の化学反応のシミュレーション：主要化学成分濃度の経時変化、Gear法と感度法の比較

るが、この計算結果は図 8 に示すように Gear 法とほとんど変わらないものであった。

また、化学反応を伴うトレーサーの移流計算のための数値計算法についての研究も報告されている。例えば、Hov *et al.* (1989)、Chock *et*

al. (1994) などである。一般的な化学反応を伴う大気環境のモデルでは、反応系の計算時間が移流拡散系のそれよりも圧倒的に長くなる。Yamartino *et al.* (1992) によれば、このような大気環境シミュレーションの計算においては、

最大90%程度までが反応系の計算に費やされていると述べている。Saylor *et al.* (1993) が改訂した酸性雨モデルSTEM-IIでは、計算時間の92~93%が反応系の計算のためであった。

6. 数値解法による大気環境モデルの適用例

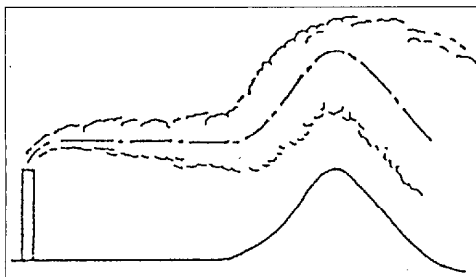
6. 1 複雑地形上の拡散モデル

数値解法による大気環境モデルについての重要な開発目的の1つが正規型ブルーム式が適用できない複雑地形上での煙の拡散挙動のモデル

化であることは容易に理解できる。例えば、Hino (1968) などの初期における数値解モデルについての報文においても、その研究目的として、この点を挙げている。

煙突の近くに煙突よりも高い山がある場合の大気汚染濃度予測の方法として、最も単純なモデルは、地表面が平坦であるとして微分方程式を解析的に解いて得られた濃度予測式を利用して、煙の流れの中心（ブルーム主軸）の位置を図9のように仮定する方法である。さらに、高い推定精度が必要な場合には、山の周囲を流れ

(a)地面上の煙軸の相対高度が一定と仮定



(b)煙軸の絶対高度が一定と仮定

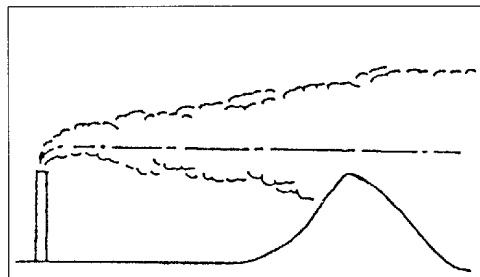


図9 山越気流中の排煙拡散のモデル

表7 ASCOT計画に参加した研究機関と大気環境モデル

研究機関	気象モデル	拡散モデル
Los Alamos国立研究所	1、2、3次元・静力学モデル 変分法・補間モデル	3次元格子モデル
Lawrence Livermore国立研究所	非静力学・有限要素モデル 変分法・補間モデル	3次元粒子法モデル (PIC)
大気海洋庁 (NOAA) 大気乱流拡散研究所	1、2次元・静力学モデル	---
Pacific Northwest研究所	1、2次元・静力学モデル	2次元流跡線モデル
Savannah River研究所	2次元・静力学モデル 変分法・補間モデル	3次元粒子法モデル (モンテカルロ法)
Utah大学	2、3次元・統計モデル	---
Colorado州立大学	3次元・静力学モデル	---

る大気の流れ（風）を計算して、その大気の流れに沿ってプルーム主軸の位置を計算するか、濃度分布自体を数値的に計算する。このような場合の大気拡散シミュレーション・システムの全体構成は図10のようなになる。ここで、この複雑地形上での大気拡散シミュレーション・システムによる計算例を図11に示す。

この分野での大気拡散のモデル化に関する研究の発展に最も貢献したのは米国DOEのASCOT計画であろう。このASCOT計画では、表7に示すような各機関がこのプロジェクトに参加し、それぞれの数値解モデルをさらに発展させ、多くの実測データとの比較を行っている

(Dickerson *et al.*, 1983)。このASCOT計画とほぼ同時期に実施された米国EPAのCTDM (Complex Terrain Dispersion Model) 開発計画では、正規型プルーム式を基礎としたモデルが採用され、後にこのCTDMモデルがEPAの指針に登録されたことから、化学反応を伴わない大気汚染物質についての複雑地形上での拡散に対する数値解法による大気環境モデルの開発はそれ以前よりもやや減少傾向にある。しかし、CTDMモデルにも問題点があり、現在も各方面で複雑地形上での煙の拡散に適用できる数値解モデルの開発についての研究が進められている。

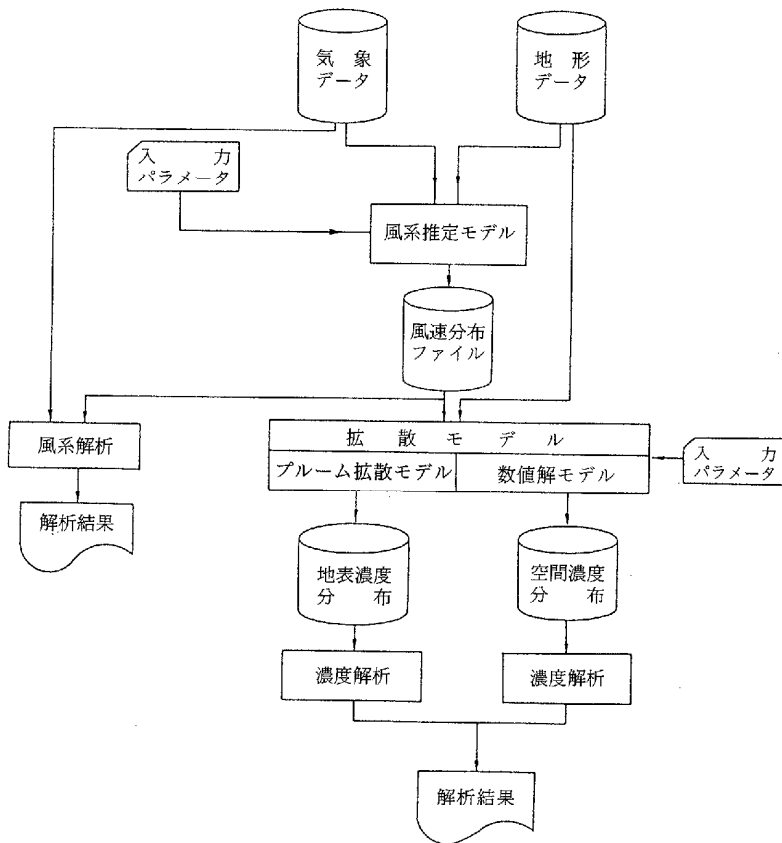
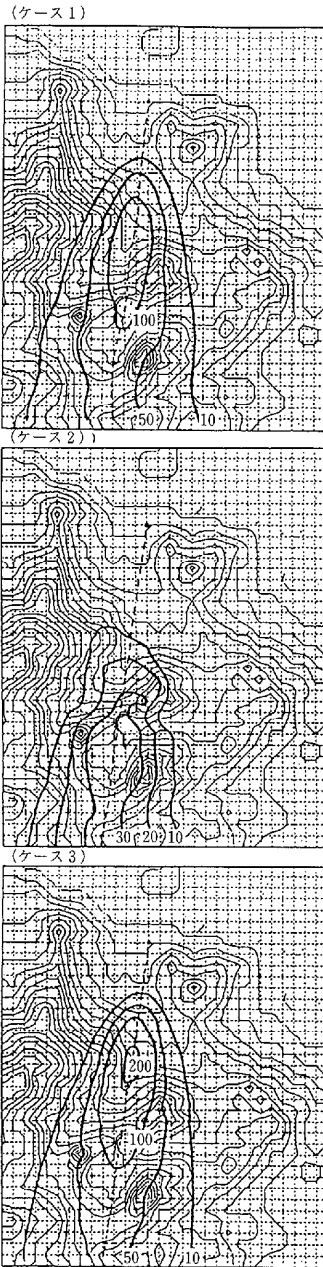


図10 複雑地形上での大気拡散シミュレーションの流れ図

(a)地表濃度分布



(b)プルーム主軸の高度

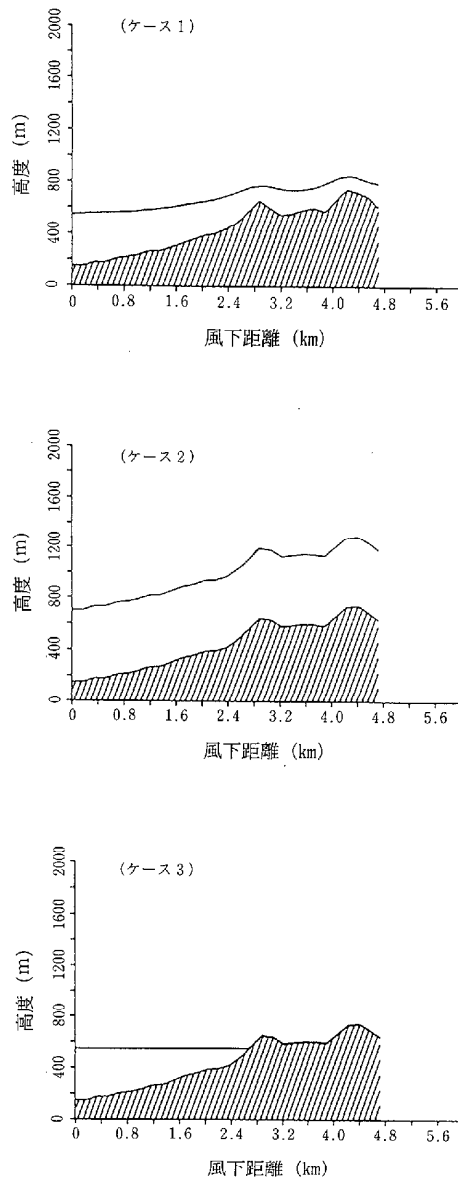


図11 複雑地形上での大気拡散シミュレーション結果、アメリカGarfield拡散実験の再現
 (a)地形図(等高線)上の地表濃度分布 (b)プルーム主軸(煙の流れ中心)の高度
 (c)エアートレーサー拡散実験が行われたGarfieldの煙突と背後の山岳地域の写真
 ケース1:ポテンシャル・フローとして気流を計算
 ケース2:地面上の煙軸の相対高度が一定と仮定
 ケース3:煙軸の絶対高度が一定と仮定

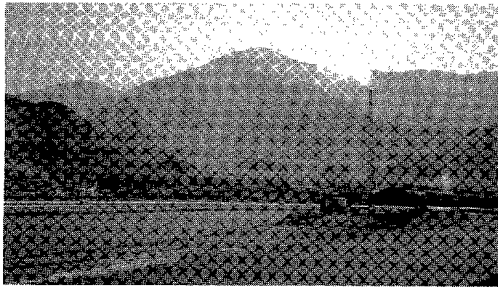


図11(c)エアートレーサー拡散実験が行われたGarfieldの煙突と背後の山岳地域の写真

6. 2 光化学大気汚染モデル

一般的な数値解法による光化学大気汚染モデルでは、3次元空間の各格子点で、反応に関与する汚染物質の数の方程式を解くことが必要である。このため、このようなモデル開発においては、大気中での各成分の物理的、化学的プロ

セスに関する現象の解明とともに、連立常微分方程式および偏微分方程式の数値解法についての正確な知識が要求される。

次に光化学大気汚染モデルの各構成要素について検討しよう。一般的な光化学大気汚染モデルは、図12に示すような構成要素(サブモデル)から構成される。これらの移流と拡散、大気中の化学反応、各汚染物質の排出強度、風向風速などの気象パラメータを推定および計算をするための各部分については、それぞれ下記のような問題を含んでいる。

① 理論式

大気中での移流拡散を表現するモデルでは、汚染物質の輸送を正しく表現し、質量保存則など物理的な要件を満足している必要がある。

また、化学反応モデルでは複数の化学物質を一括して扱うことなどもあるが、種々の条件下においても主要物質の濃度変化を正しく表現で

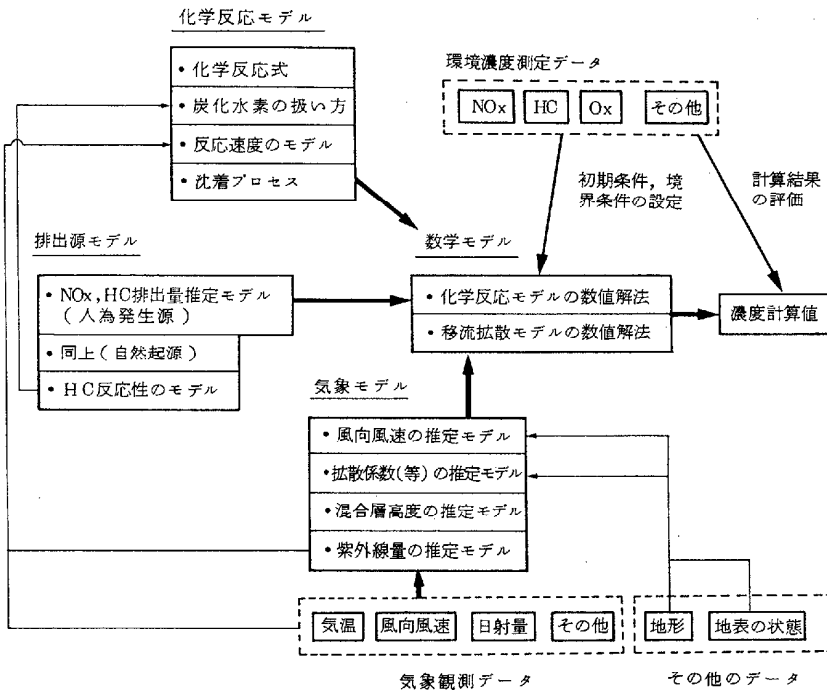


図12 光化学大気汚染モデルの構成

ることが必要である。

② 排出源

窒素酸化物、炭化水素 (HC) の排出量などを正確に求めることは困難であるが、特に炭化水素の場合には、使用する化学反応モデルに対応した種別の排出量 (非メタン、プロピレン、オレフィン系炭化水素など) 及び反応性についても調査する必要がある。

また、植物から放出されるテルペン類などの炭化水素、成層圏から供給されるオゾンなどに関する問題もある。

③ 化学反応モデル

大気中に存在する多数の炭化水素に関する反応機構を詳細にモデル化することは困難であるため、特定機構 (代理) モデル、あるいは一般化機構 (一括) モデル、のどちらかが使用されることが多い。

代理モデルは、プロピレン、ブタンなど特定の炭化水素を含む反応系を対象としたものである。したがって、実際のシミュレーションに際しては、大気中の非メタン炭化水素の $1/2 \sim 1/5$ がプロピレンに相当するというように換算を行って、各汚染物質の濃度を計算する。

また、一括モデルでは、反応に関与する炭化水素を 1 種類から数種類の仮想炭化水素 (例えばオレフィン系炭化水素、アルデヒド類など) で代表させ、炭化水素、 NO_2 、 NO_3 などの濃度変化を正確に記述できるような速度定数や化学量論係数を設定する。

6. 3 酸性雨モデル

酸性雨による酸の降下量の予測およびそれに関連する大気中での二次粒子 (酸性微粒子) 濃度、その沈着量、および降水中の各種イオン濃度や pH を計算するためのシミュレーションモデルの全体を酸性雨モデルと呼ぶことにしよう。そして、これらのモデルは大別して、毎日の濃度変化や沈着量を求める短期モデルと、月平均や年平均での濃度や沈着量を計算する長期モデルに分類できる。そして、この酸性微粒子は粒

径が細かく、沈着速度が遅いことから、大気中の寿命が長く、数千 km の風下まで輸送されるので、そのシミュレーションには計算対象範囲を広くとることが必要である。

1 時間から 1 日程度の平均化時間における酸性微粒子等の濃度を求めるシミュレーションモデルはほぼ光化学大気汚染モデルと同様のモデル構成になっており、大きくは格子 (オイラー) モデルと流跡線 (ラグランジュ) モデルに分類できる。

このようなモデルでは、煙源から 1000 km 以上の風下までの汚染物質の濃度変化を表現する必要があるため、一般には格子間隔は 10~200 km 程度となる。このため、大規模点発生源からの煙が短時間に広い格子内に均一に分散するという仮定は不自然である。このため、点煙源から排出された初期の煙はパフモデル (流跡線パフモデル) で表現し、十分に拡散幅が大きくなった後に、そのパフに該当する煙の量に相当する濃度増加分を格子モデルの発生源項に加算する方法が考えられている。このようなモデルを混合モデルと呼んでいる。

流跡線モデルには、リセプター基準モデルと発生源基準モデルがある。前者は、特定のリセプター (濃度計算地点) を基点として、一定時間間隔ごとに到着する気塊 (air mass) の位置を求め、その気塊中での一次汚染物質 (SO_2 など) と二次汚染物質 (SO_4^{2-} など) の収支を計算するものである。したがって、このモデルでは、リセプターを基点として、時間をさかのぼって、逆向きに流跡線の位置を計算していく。一方、発生源基準モデルでは、発生源を基点として、時間の経過とともに変化する気塊の位置を前進的に求めていく方法である。

酸性雨の原因となる酸性微粒子等の汚染物質の長距離輸送を解析するモデル (長距離輸送モデル、Long Range Transport Model、LRT モデルとも呼ぶ) の開発についての研究は 1970 年代の後半から 1980 年代の前半にアメリカ、カナダ及びヨーロッパ諸国において活発に行われ、1980 年代後半以降は新規開発は減少している。

しかし、最近の傾向としては、次のような2極分化の傾向が明確になっている。

① 可能な限り最高速、大容量の電子計算機を使用し、最新の大気化学、雲物理、数値計算法などに関する知見を最大限に利用して、酸性雨の機構をより正確にモデル化するための研究

② 実用的な計算量であり、利用可能な発生源及び気象データを用いて、行政的に利用できるものを既存モデルの中から選択するための研究。ここでの研究は、行政的に利用できる予測性能を有するものであるか否かを客観的に評価することが主体であり、このような研究では、候補

表8 最近における精巧な酸性雨モデルの比較

モデル名称	RADM Regional Acid Deposition Model	ADOM Acid Deposition Oxidant Model	STEM-II Sulfur Transport Eulerian Model
文献	Chang <i>et al.</i> (1987)	Venkatram <i>et al.</i> (1988) Misra <i>et al.</i> (1989)	Shim and Carmichael (1991)
スポンサー	EPA (National Acid Precipitation Assessment Program; NAPAP)	OME(カナダ、オンタリオ州環境省) Environment Canada Umweltbundesamt (ドイツ) EPRI (アメリカ電力研究所)	EPA (Mesoscale Acid Deposition Program)
研究実施機関	NCAR (国立大気研究センター) SUNY (ニューヨーク州立大学)	ERT社 (Env.Res.&Tech.Inc) Mep Co. (カナダ)	BNL (Brookhaven国立研究所) NASA (航空宇宙局) アイオワ大学、ケンタッキー大学 Meso Inc.
移流拡散方程式の解法	Smolarkiewiczの反復風上差分法 (第1段階は風上差分法、第2段階は疑似拡散を除去するための修正計算)	・セル中心フラックス法 ・修正3次スプライン法	Petrov-Crank-Nicolson-Galerkin有限要素法
化学反応 (気相反応) (液相反応)	36化学種、77素反応 (輸送計算対象は24種) 13イオン種の化学平衡を仮定、ヘンリーの法則と平衡条件より濃度を求める	50化学種、約100素反応 (輸送計算対象は30種) 13化学種、25素反応	60化学種、約85素反応 (輸送計算対象は39種) 22イオン種、17平衡式
気象モデル	15層・静力学・プリミティブ方程式モデル 三次元の風、気温、水蒸気量及び地表気温、地表気圧、降水強度を1時間ごとに求める	カナダ気象センターの天気予報モデルの出力を上側境界条件とする 16層一次元モデル (格子点=4、7、12、25、50、...、2000m) により風、温位、乱流エネルギーを求める	静力学・非圧縮ナビエ・ストークスモデル及び高層気象観測データより、三次元の風、降水強度、雲底高度、混合層高度を求める (北アメリカ全体50kmメッシュよりネスティング)
雲のモデル	小領域での鉛直移流、液相反応、洗浄効果は一次元の雲物理モデルと液相反応モデル、洗浄モデルより求める	ほぼ同左	ほぼ同左
発生源	NAPAPとEPRIのデータより推定; SO ₂ , SO ₄ ²⁻ , NO, NO ₂ , CO, NH ₃ , 揮発性有機物質VOC10種	NAPAPバージョン5.2発生源データ; SO ₂ , SO ₄ ²⁻ , NO ₂ , NH ₃ , 反応性炭化水素RHC 8種	NAPAPバージョン5.2発生源データ
計算対象	北アメリカ北東部 1981年4月22~24日	北アメリカ北部OSCAR (Oxidation and Scavenging Characteristics of April Rains) 観測対象地域 1981年4月 (16日間)	アメリカPhiladelphia地域 2 May 1985 Philadelphia field study対象地域 1985年5月2日
メッシュ数(x,y,z) 水平方向分解能	30×30×6 80 km	33×33×12 127 km	10×10×14 20 km

モデルの比較検討と実測データによる検証が中心となる (Clark, *et al.*, 1989)。

ここで、最近までに開発された代表的な酸性雨モデルを表 8 に示す。このような酸性雨の機構の詳細なモデル化に際しては、大気中での物理的および化学的な現象に関する多くのサブシステムを必要としている。そして、それぞれの要素の開発には高度の専門知識が要求される。ADOMの開発者であるVenkatram (1988) によれば、このような複雑な総合モデルにおいては、部分的に正確なサブシステムを集めても、全体として現象を正しく表現できる保証はない。事実や経験に基づかない科学的な趣意はモデルに信憑性を与えることはできても、それによって、実測データによるモデルの検証を代用することはできないと述べられている。このことは酸性雨モデルのみに限らず、すべての行政的に利用される大気環境シミュレーション・モデルに当てはまる事項であり、環境予測のためのソフトウェアの品質保証に関してきわめて重要なことである。

6. 4 自動車排出ガスの大気環境モデル

自動車排出ガスによる大気環境のモデル化についての研究が各方面で行われるようになったのは1960年代の後半からであり、初期の研究としては船舶技術研究所の渡辺 (1967) のモデル、日本機械学会の自動車排出ガスによる大気汚染に関する研究分科会のAPPSモデル (近藤, 1973) などが有名である。なお、これらのモデルが当時、煙突からの煙の拡散の予測に使用されていた正規型ブルーム式を用いていないことも注目される。また、アメリカにおいても1970年代の前半に提出されたモデルとしては、Danald *et al.* (1971)、Sklarew *et al.* (1972)、Egan *et al.* (1973) など拡散の微分方程式の数値解法によるものが多い。

また、HIWAYモデルやCALINEモデルなどの正規型ブルーム式のモデルもほぼ同時期に提案されている。そして、これらのモデルから発

展した HIWAY-2、CALINE-3モデルなどの正規型ブルーム式を主体としたモデルが、この分野においても、1970年代後半以降の主流となっていく。

わが国における数値解法による自動車排出ガスの大気環境モデルとしては、日本機械学会のAPPSモデルが有名であり、このモデルに関しては、自動車排出ガスによる大気汚染に関する研究分科会 (1972)、近藤 (1973) に紹介されている。その後、APPSモデルの改良は日本自動車研究所 (JARI) に受け継がれ、これらの成果は日本自動車研究所・大気汚染解析研究委員会 (1972)、杉山 (1973) に報告されている。また、自動車排出ガス拡散研究会 (環境庁委託) (1975)、フジミック (環境庁委託) (1979)、黒沼、ほか (1975) などにおいても同様のモデル化についての研究を行っている。これらのモデルはビルに囲まれた道路内の風の分布を流体の運動方程式あるいは連続の式から求め、この計算された風の場の中での汚染物質の移流と拡散を拡散の微分方程式の数値解法により求めるものである。大型電子計算機においてもこの種の数値計算が容易ではなかった1960年代後半において、このようなモデルが開発されたことは大きな成果であるが、接地境界層内での乱流拡散における拡散係数などの気象学的なパラメータの推定方法など、流体機械内の流れのモデル化とは異なる要素に十分な配慮が加えられていない点に問題も残されている。また、これらのモデルの開発と評価に利用されるデータベース構築のためのフィールド調査を軽視したことが、これらのプロジェクトが成功しなかった最大の原因であろう。

道路構造や道路両側の状態がある程度の区間にわたって一定であれば、自動車排出ガスの拡散は道路と直角方向の2次元モデルで近似できることは、すでに2. 3節で述べた。ここで、高層ビルに囲まれた道路内の気流と自動車排出ガスの濃度分布を2次元モデルで計算した例をOkamoto *et al.* (1994) より引用して、図13に示す。このように、一定の条件下においては、

ビルに囲まれた道路内での循環流やその気流に支配される濃度分布の特徴についても、2次元モデルにより、ある程度は表現できる。

アメリカにおいては、一連の大気環境モデル性能評価研究の中で自動車排出ガスについての大気環境モデルも取り上げられ、最終的には

CALINE3モデルが指針の推奨モデルとして採用されているが、この研究の過程で数値解法を利用したモデルもいくつか候補として検討に加えられている。しかし、ここでの検討は主に市街地を除く平坦部の道路を対象としており、トンネル坑口、高層ビル街の道路など数値解法に

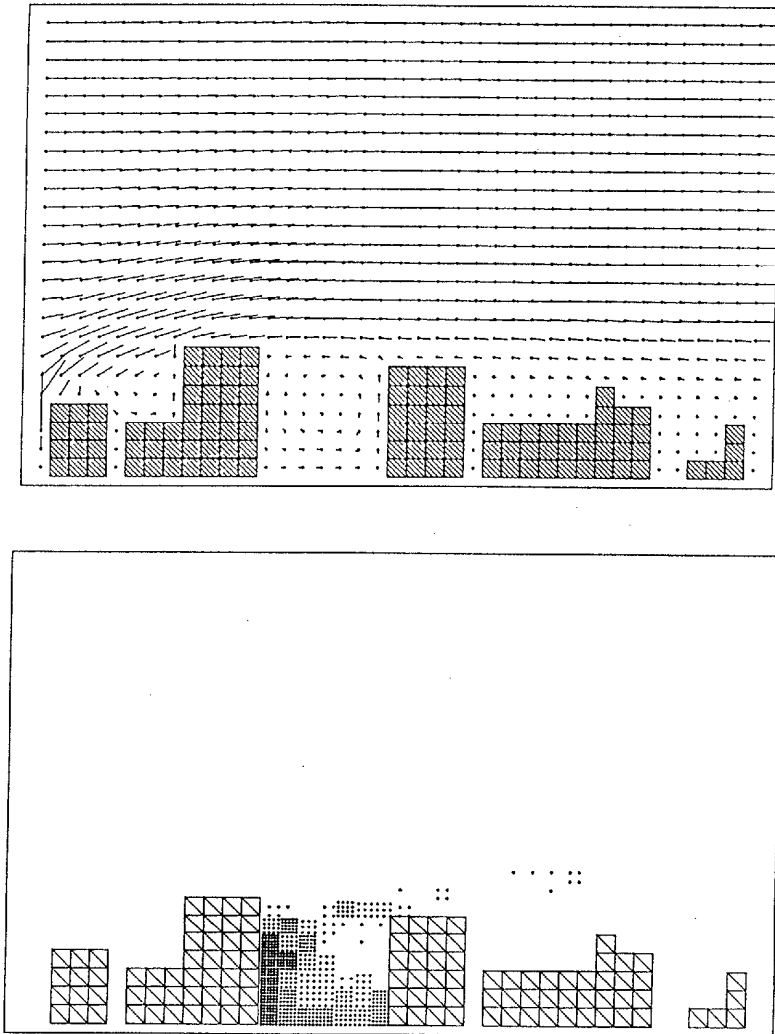


図13 2次元モデルにより計算された高層ビルに囲まれた道路内の気流と自動車排出ガスの濃度分布

表9 Sistla *et al.*(1979), Rao *et al.*(1980)による自動車排出ガス拡散モデルの評価結果

モデル名称	特 徴	実測値と計算値の相関関係の2乗(寄与率)	
		GMテストコース	ロングアイランド高速道路
HIWAY	正規型ブルームモデル(米国EPA)	0.26	0.45
GM	〃 (GM社)	(0.83)*	0.86
CALINE2	〃 (カリフォルニア州)	0.24	0.41
AIRPOL4	〃 (バージニア州)	0.49	0.62
DANARD	差分モデル(2次元)	0.14	0.76
MROAD2	〃 (2次元)	0.20	0.76
RAGLAND	〃 (平行風時3次元)	—	0.60
ROAD2	〃 (2次元)	0.20	0.70

(注)データ数はGMテストコースで594(CALINE2のみ509)、ロングアイランド高速道路では133(差分型のモデルでは126)である。

*GMモデルはGMテストコースでの実験データに基づいて開発されているので、この数値による評価は公平なものとはいえない。

よるモデルの利点が発揮できる状況にはなかったことを理解しておく必要がある。

Sistla *et al.* (1979) はニューヨーク州の拡散実験データを使用して、Rao *et al.* (1980) はGM社の拡散実験データを使用して、数種類の正規型ブルーム式及び差分解法によるモデルの評価を行っている。これらの実験はともに道路(GM実験ではテストコース)の両側に障害物のない直線区間を対象として、道路と直角な鉛直断面内の濃度(SF₆トレーサーガス)の計測を行っている。この結果を表9に示す。ここで、Danard (1971)、Ragland and Peirce (1973)の数値解モデルは接地境界層内の風と拡散係数の分布も考慮しているものである。しかし、ここに取り上げられたモデルに関する限り、数値解モデルは正規型ブルーム式のモデルよりも推定精度が高いとはいえない。この原因については種々の検討が加えられているが、最大の理由は以下の問題であろうと思われる。

① すべての正規型ブルーム式では、道路沿道での初期拡散幅の設定において、実測データに

基づいて推定された方法を採用しており、走行車両に起因する乱れの効果を間接的には考慮に入れている。

② すべての数値解モデルでは、風速と拡散係数の設定に関して、接地境界層内の気象学的知識を考慮に入れているが、走行車両による平均風向風速、乱流成分、温度成層に対する影響を考慮に入れていない。

この走行車両による乱流を考慮に入れた数値解法のモデルとしてはEskridge and Rao (1986)がある。このモデルでは、GM拡散実験データに基づく検証において、相関係数0.87、回帰係数1.18(データ数N=1157)と従来の正規型ブルーム式のモデルよりも高い評価が得られている。このことは、従来の数値解モデルでは流体力学的基本式の数値解法の研究までにとどまっており、走行車両による道路上での乱流特性の変化、種々の気象条件下での拡散係数の変化にまでは配慮がなされていなかったことを示唆しているように思われる。

わが国では1970年代後半より自動車排出ガス

規制の効果によって、大部分の市街地の道路沿道においてもCO濃度は十分に低くなり、このような数値解モデル開発の要請は著しく減少した。しかし、1980年代の後半より、主要道路沿道でのNO₂環境基準未達成の状態が改善されないことが大きな問題となり、正規型ブルーム式が適用できない高層ビルに囲まれた交差点などにも適用できるシミュレーションモデルとして、数値解法の大気環境モデルが注目されるようになってきている。

6. 5 建屋周辺の大気環境モデル

建屋に風が当たると背後に渦が生じたり、剝離が生じることはよく知られており、流れの数値シミュレーションにおいても、このような現象が扱われることは多い。このような流れの中に大気汚染物質を放出すれば、その挙動も複雑になる。しかし、このような分野における拡散シミュレーションに数値解法のモデルが本格的に使用された実績はほとんど皆無である。ここで、本格的と言ったのは、単に計算された流れ場にトレーサーを乗せて流線の変化を見るとか、定性的に濃度分布を把握するという程度の試算ではなく、大気汚染物質あるいはトレーサーの1時間平均濃度を相当な例数について計算し、定量的な予測性能の評価まで実施されているものを対象としている。ビルに囲まれた道路（ストリート・キャニオン）内での自動車排出ガスの拡散予測を除外すれば、このようなシミュレーション・モデルに関する報告が少ない原因としては、次のような事項が考えられる。

① 建屋に当たる風の方向（風向）がわずかに変化するだけでも、建屋周辺の気流が大きく変化することもあり、風向変動（ σ_A ）の大きいときの1時間平均濃度に対応する流れ場（風）の再現は難しい。

② 上記の項目とも関連するが、建屋によるダウンドラフトを初期拡散幅 σ_0 の増加で表現する程度の簡便な正規型ブルーム式のモデルと比較して、数値解法によるモデルにおいて、どの

程度に予測性能が向上するかという疑問がある。

③ 建屋直近の場所では正規型ブルーム式は適用できないが、建屋よりも少し離れた場所であればダウンウォッシュとダウンドラフトを考慮できる正規型ブルーム式のモデル（例えばISC2モデル等）により濃度予測ができることを米国EPA指針が説明している。

以上のような背景から、この分野での数値解法による大気環境モデルの開発は遅れている。しかし、都市内でのコ・ジェネレーション・システムの普及などにより、近隣の発生源による建屋高層階の壁面での汚染濃度を予測する場合など建屋周辺での汚染予測に適用できる予測手法の開発が待たれている。

7. まとめ

ここでは、数値解法を利用した大気環境のシミュレーションモデルについて、その特徴や適用事例などを概観した。このような数値解による大気環境モデルでは、正規型ブルーム式の場合のようなモデル適用上の制約条件はあまり考えなくても良い。しかし、必要な入力データが得られない場合には、簡便な解析解を用いた大気環境モデルよりも高い推定精度を期待することはできない。

また、数値解の大気環境モデルでは、移流拡散の基礎式は同一であっても、その離散化の方法によって濃度計算値が大きく変化することにも注意を払う必要がある。したがって、このような数値解による大気環境モデルを行政的に利用する場合には、コンピュータのソースコードでモデルを特定することが不可欠であり、単なる方法論の記述のみでは唯一の計算値を与える予測手法であることを保証することはできない。

大気中での光化学反応や乱流拡散現象のモデル化についての研究は、コンピュータの発達によって可能になったと言っても過言ではない。しかし、これらの研究分野においては、依然として、コンピュータの性能が最大の制約条件となっていることも事実である。そして、将来の発展のためには、コンピュータのハード、ソフ

ト両面での進歩が期待されている。

参考文献

- Beaton, J.L., Ranzieri, A.J., Shirley, E.C. and Skog, J.B., Air quality manual vol.4, Mathematical approach to estimating highway impact on air quality, California Division of highways, FHWA-RD-72-36, 1972.
- Carmichael, G.R., Kitada, T. and Peters, L.K., Application of a Galerkin finite element method to atmospheric transport problems, *Computers and Fluids*, 8, 155-176, 1979.
- Carmichael, G.R., Peters, L.K. and Kitada, T., A second generation model for regional-scale transport/chemistry/deposition. *Atmos. Environ.*, 20, 173-188, 1986.
- Carmichael, G.R., Cohen, D.M., Cho, S.Y. and Oguztuzun, M.H., Coupled transport/chemistry calculations on the massively parallel processor computer, *Computers Chem. Engng.*, 13, 9, 1065-1073, 1989.
- Chan, S.T., Ermak, D.L. and Morris, L. K., FEM3 model simulations of selected Thorney Island phase I trial, *J. Haz. Mag.*, 16, 267-292, 1987.
- Chang, J.S., Brost, R.A., Isaksen, I.S.A., Madronich, S., Middleton, W. R. and Walcek, C.J., A three-dimensional Eulerian acid deposition model: physical concepts and formulation, *J. Geophys. Res.*, 92, 14681-14700, 1987.
- Chock, D.P. and Dunker, A.M., A comparison of numerical methods for solving the advection equation, *Atmos. Environ.*, 17, 1, 11-24, 1983.
- Chock, D. P., A comparison of numerical methods for solving the advection equation-II, *Atmos. Environ.* 19, 4, 571-586, 1985.
- Chock, D. P., A comparison of numerical methods for solving the advection equation-III, *Atmos. Environ.* 25A, 5/6 853-871, 1991.
- Chock, D. P. and Winkler, S.L., A comparison of advection algorithms coupled with chemistry, *Atmos. Environ.* 28, 16, 2659-2675, 1994.
- Clark, T.L., *et al.*, The evaluation of long-term sulfur deposition models. *Atmos. Environ.* 23, 10, 2267-2288, 1989.
- Dabdub, D. and Seinfeld, J.H., Air quality modeling on massively parallel computers, *Atmos. Environ.* 28, 1679-1687, 1994.
- Dabdub, D. and Seinfeld, J.H., Extrapolation techniques used in the solution of stiff ODEs associated with chemical kinetics of air quality models, *Atmos. Environ.* 29, 3, 403-410, 1995.
- Danard, M.B., Koneru, R.S. and Slawson, P. R., A numerical model for carbon monoxide concentrations near a highway, *proc. Symp Air Poll. Turb. and Diff.*, AMS, 152-157, 1971.
- Dickerson, M.H. and Gudiksen, P.H., Atmospheric studies in complex terrain; technical progress report fy-1979 through fy-1983, UCID-19851, 1983.
- Donea, J., A Taylor-Galerkin method for convective transport problems, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 20, 101-119, 1984.
- Dunker, A.M., The reduction and parameterization of chemical mechanisms for inclusion in atmospheric reaction-transport models, *Atmos. Environ.*, 20, 3, 479-486, 1986.
- Egan, B.A. and Lavery, T.F., Applications of a numerical simulation model to the dispersion of vehicular emissions near highways, *proc. Int. Third Clean Air Cong., IUAPPA*, B7-B9, 1973.
- Eskridge, R.E. and Rao, S.T., Turbulent diffusion behind vehicles: experimentally

- determined turbulence mixing parameters, *Atmos. Environ.* 20,5, 851-860, 1986.
- Forester, K.C., Higher order monotonic convective difference schemes, *J.Comput. Phys.*, 23, 1-22, 1977.
- Gear, C.W., The automatic integration of ordinary differential equations. *Com. ACM*, 14, 3, 176-179, 1971.
- Gidel, L.T., Crutzen, P.J. and Fishman, J., A two-dimensional photochemical model of the atmosphere I: Chlorocarbon emissions and their effect on stratospheric ozone, *J.Geophys.Res.*, 88, C11, 6622-6640, 1983.
- Gresho, P.M., Chan, S.T., Upson, C.D. and Lee, R.L., A modified finite element method for solving the time-dependent, incompressible Navier-Stokes equations, Lawrence Livermore National Lab., UCRL-88937, 1983.
- Hansen, D.A., Barnes, H.M. Lusi, M. and Puckett, K.J., A north american field study to evaluate eulerian models, *Air Poll. Modeling and Its Appl.*, 7, 297-306, 1988.
- Harley, R.A., Russell, A.G., McRae, G.J., Cass, G.R. and Seinfeld, J.H., Photochemical modeling of the southern California air quality study, *Environ. Sci. Technol.*, 27, 378-388, 1993.
- Havens, J.A. and Schreurs, P.J., Evaluation of 3-D hydrodynamic computer models for prediction of LNG vapor dispersion in the atmosphere, 8th Int. Conf. Liquefied Natural Gas, Session III, 4, 1-21, 1986.
- Hesstvedt, E., Hov, ϕ . and Isaksen, I.S.A., Quasi-steady-state approximations in air pollution modeling, *Comp. J. Chem. Kinet.*, 10, 971-994, 1978.
- Hino, M., Computer experiment on smoke diffusion over a complicated topography, *Atmos. Environ.*, 2, 541-558, 1968.
- Hotchkiss, R.S. and Hirt, C.W., Particulate transport in highly distorted three-dimensional flow fields, *proc. Summer Computer Simulation Conf.* 1972, 1037-1046, 1972.
- Hov, ϕ , Zlatev, Z., Berkowicz, R., Eliassen, A. and Prahm, L.P., Comparison of numerical techniques for use in air pollution models with non-linear chemical reactions, *Atmos. Environ.*, 23, 5, 967-983, 1989.
- Kumar, N., Odman, M.T. and Russell, A.G., Multiscale air quality modeling: Application to southern California, *J.Geophys. Res.*, 99, D3, 5385-5397, 1994.
- Lamb, R.G., A regional scale (1000km) model of photochemical air pollution part I. Theoretical formulation, *Env. Sci. Res. Lab.*, U.S.EPA, 1982.
- Lange, R., ADPIC - A three-dimensional Particle-In-Cell method for the dispersal of atmospheric pollutants and its comparison to regional tracer studies, *J. Appl. Meteorol.*, 17, 320-329, 1978.
- Levin, E., Grand challenges to computational science, *Commun. ACM.*, 32, 1456-1457, 1989.
- MacCracken, M.C., Crawford, T.V. Peterson, K.R. and Knox, J.B., Development of a multi-box air pollution model and initial verification for the San Francisco bay area, Lawrence Radiation Laboratory UCRL-73348, 1971.
- McKeen, S.A., Hsie, E.Y., Trainer, M., Tallamraju, R. and Liu, S.C., A regional model study of the ozone budget in the eastern United States, *J.Geophys. Res.*, 96, D6, 10809-10845, 1991.
- McRae, G.J., Goodin, W.R. and Seinfeld, J.H., Development of a second generation mathematical model for urban air pollution I-model formulation, *Atmos. Environ.*, 16,

- 679-696, 1982.
- McRae, G.J., Goodin, W.R. and Seinfeld, J.H., Numerical solution of the atmospheric diffusion equation for chemically reacting flows, *J. Comput. Phys.*, 45, 1-42, 1982.
- Mikkelsen, T., Modelling diffusion and dispersion of pollutants, chapter VI in "Diffusion and transport of pollutants in atmospheric mesoscale flow field", ed. Gyr, A. and Rys, F.S., Kluwer Academic publ., 1995.
- Misra, P.K., Bloxam, R., Fung, C. and Wong, S., Non-linear response of wet deposition to emissions reduction: A model study, *Atmos. Environ.*, 23, 671-687, 1989.
- Morris, R.E. and Myers, C.M., User's guide for the urban airshed model, U.S.EPA, EPA-450/4-90-007A, 1990.
- Okamoto, S., Lin, F.C., Yamada, H. and Shiozawa, K., Development and application of an air quality simulation model for automobile emissions in a street canyon, Proc. 7th IUAPPA Conf. Air Poll. Waste Issues, 97-106, 1994.
- Prather, M., McElroy, M., Wofsy, S., Russell, G. and Rind, D., Chemistry of the global troposphere: Fluorocarbons as tracers of air motion, *J. Geophys. Res.*, 92, D6, 6579-6613, 1987.
- Ragland, K.W. and Peirce, J.J., Boundary layer model for air pollutant concentrations due to highway traffic, *J. Air Poll. Control Assoc.*, 25, 1, 48-51, 1973.
- Rasch, P.J., Boville, B.A. and Brasseur, G.P., A three-dimensional general circulation model with coupled chemistry for the middle atmosphere, *J. Geophys. Res.* 100, D5, 9041-9071, 1995.
- Rao, S.T., Sistla, G., Keenan, M.T. and Wilson, J.S., An evaluation of commonly used highway dispersion models, *J. Air Poll. Control Assoc.*, 30, 3, 239-246, 1980.
- Rao, S.T. and Visalli, J.R., On the comparative assessment of the performance of air quality models, *J. Air Poll. Control Assoc.*, 31, 8, 851-860, 1981.
- Reynolds, S.D., Roth, P.M. and Seinfeld, J.H., Mathematical modeling of photochemical air pollution I. Formulation of the model, *Atmos. Environ.*, 7, 1033-1061, 1973.
- Rood, R.B., Numerical advection algorithms and their role in atmospheric transport and chemistry models, *Reviews of Geophysics*, 25, 1, 71-100, 1987.
- Roth, P.M., Reynolds, S.D., Roberts, P.J.W. and Seinfeld, J.H., Development of a simulation model for estimating ground level concentrations of photochemical pollutants, 71SAI-21, Systems Applications Inc., San Rafael, Ca.USA, 1971.
- Saylor, R.D. and Fernandes, R.I., On the parallelization of a comprehensive regional-scale air quality model. *Atmos. Environ.*, 27A, 625-631, 1993.
- Shim, S.G. and Carmichael, G.R., The STEM-II acid deposition and photochemical oxidant model II. A diagnostic analysis of mesoscale acid deposition, *Atmos. Environ.*, 25B, 1, 25-41, 1991.
- Shim, S.G. and Carmichael, G.R., Comprehensive air pollution modeling on a multi-processor system, *Computers Chem. Engng.*, 16, 8, 805-815, 1992.
- Simpson, D., Long-period modelling of photochemical oxidants in Europe, model calculations for July 1985. *Atmos. Environ.*, 26 A, 9, 1609-1634, 1992.
- Shir, C.C. and Shieh, L.J., A generalized urban air pollution model and its application to the study of SO₂ distribution in the St. Louis metropolitan area, *J. Applied*

- Meteorol., 13, 2, 185-204, 1974.
- Sistla, G., Keenan, M. and Rao, S.T., A study of pollutant dispersion near highways, Atmos. Environ., 13, 669-685, 1979.
- Sklarew, R.C., Fabrick, A.J. and Parger, J.E., A Particle-In-Cell method for numerical solution of the atmospheric diffusion equation and applications to air pollution problems, Systems, Science and Software report 3SR-844, 1971.
- Sklarew, R.C., Fabrick, A.J. and Parger, J.E., Mathematical modeling of photochemical smog using the PICK method, J. Air Pollut. Control Assoc., 22, 11, 865-869, 1972.
- Sklarew, R.C., Fabrick, A.J. and Prager, J.E., Atmospheric simulation modeling of motor vehicle emissions in the vicinity of roadways, proc. Summer Computer Simulation Conf., 1972, 1054-1061, 1972.
- Smith, F.G. and Garrett, A.J., Two-dimensional Monte Carlo transport and diffusion model, chapter A.10 in "Atmospheric Studies in Complex Terrain Technical Progress Report FY-1979 through FY-1983", ed. Dickerson, M.H. and Gudiksen, P.H., Lawrence Livermore Nat. Lab. UCID-19851, 1983.
- Smolarkiewicz, P.K., A fully multidimensional positive definite advection transport algorithm with small implicit diffusion, J. Comput. Phys., 54, 325-362, 1984.
- Uliasz, M., The atmospheric mesoscale dispersion modeling system, J. Appl. Meteorol., 32, 139-149, 1993.
- Venkatram, A., Karamchandani, P.K. and Misra, P.K., Testing a comprehensive acid deposition model, Atmos. Environ., 22, 737-747, 1988.
- Yamartino, R.J., Scire, J.S., Carmichael, G.R. and Chang, Y.S., The CALGRID mesoscale photochemical grid model I. model formulation, Atmos. Environ., 26A, 8, 1493-1512, 1992.
- 岡本眞一、小林恵三、卯田太一郎、池田有光、小林峰生、複雑地形上の大気汚染シミュレーションのための三次元差分モデル2、産業公害、27、634-641, 1991.
- 岡本眞一、大気環境アセスメントのためのコンピュータ流体解析の基礎、産業環境管理協会・丸善、1993.
- 岡本眞一、寺中誠一、小林恵三、堀内健司、大気環境シミュレーションのための数値解法の比較研究、日本機械学会第72期通常総会講演会、No.95-1, 135-136, 1995.
- (株)フジミック、環境庁委託、自動車排出ガス拡散に関する研究、1979.
- 黒沼秀友、東原紘道、堀江清一、自動車排出ガスによる大気汚染推定モデルについて、交通工学、10、3、21-30, 1975.
- 近藤次郎、自動車排出ガスによる大気汚染の研究、日本機械学会誌、76、653 619-627, 1973.
- 近藤裕昭、長距離輸送と複雑地形を対象とした大気拡散シミュレーションモデルについて、公害、20、2、1-25, 1985.
- (株)産業公害防止協会、起伏のある地形上における大気拡散シミュレーションプログラム開発研究報告書、1982.
- (株)日本自動車研究所、大気汚染解析研究委員会、自動車排出ガスによる大気汚染の実態調査と汚染予測の研究、日本自動車研究所・研究所速報、9, 1972.
- 塩沢清茂、岡本眞一、光化学大気汚染モデル、産業公害 16、241-250, 1980.
- 自動車排出ガスによる大気汚染に関する分科会、自動車排出ガスによる大気汚染に関する分科会報告、日本機械学会誌、75、637、274-281, 1972.
- 自動車排出ガス拡散研究会、環境庁委託、高速道路における自動車排出ガス拡散に関する研究、1975.
- 杉山博海、風速の影響を考慮した交差点付近の自動車排出ガスの拡散モデル、日本自動車研

究所速報、14、1973.
堀内潔、流体計算に対するスーパーコンピュータの役割とその応用、bit臨時増刊号、19、13、140-146、1987.
村尾直人、感度法による反応サブモデルの構築、

「地球規模の大気汚染物質濃度予測に関する研究」・第3章、鉄鋼業環境保全技術開発基金・4助研資料4-7,1994.
渡辺健次、排気ガスの大気乱流拡散-I、船舶技術研究所報告、4、6、233-241、1967.