

## 大気境界層のスカラーの乱流モデル

Turbulence Model for Scalars in the Atmospheric Boundary Layer

半場 藤 弘\*

Fujihiro HAMBA

大気境界層の温度や大気汚染物質の濃度などのスカラーの輸送拡散を計算するときKモデルという渦拡散型のモデルがよく使われる。本研究ではKモデルについて2種類の改良を試みる。まずKモデルに化学反応の効果を取り入れ、NO、NO<sub>2</sub>、O<sub>3</sub>の反応を考え、濃度の拡散の1次元計算を行う。Kモデル、修正Kモデル、2次のクロージャーモデルの計算結果を比較する。次にKモデルの渦拡散項より高次の項を追加し、トップダウン・ボトムアップ拡散や逆勾配拡散の現象の説明を行う。3次元のLES (Large Eddy Simulation) のデータを用いてモデルの係数の分布を求め考察する。

## 1. はじめに

大気汚染物質の輸送拡散や都市のヒートアイランドなどの大気現象を研究するには大気対流と熱や物質の輸送の数値シミュレーションが必要である。それらの現象は地上から約10 kmまでの大気層である対流圏で起こるが、その中でも特に地上から約1 kmまでの対流の活発な大気境界層が重要な役割を果たす。図1は大気境界層の模式図<sup>1)</sup>である。昼間日射によって地面が暖められ、浮力によって対流が生じている。境界層の上は安定な温度成層で比較的乱れが小さく、境界層のふたの役目をしている。一方地表面では熱や物質のやりとりが行われる。したがって大気汚染物質の輸送拡散を考察するには、対流圏の中でも特に大気境界層のふるまいを調べることが不可欠となる。

大気境界層の速度場や温度場はクロージャーモデル<sup>2)</sup>やLES (Large Eddy Simulation)<sup>3)</sup>で研究されている。本研究では温度や汚染物質の濃度などのスカラーの輸送拡散に注目し、乱流モデルの改良を試みる。まず大気汚染物質の輸送の数値計算で用いられている拡散の乱流モデルの例を紹介する。次に化学反応の効果を取り入れることによってKモデルを修正する。最後に渦拡散項より高次の項を用いることによってKモデルを修正する。

## 2. 大気汚染物質輸送の数値計算における拡散モデル

Trainer et al.<sup>4)</sup>は郊外の大気NOなどの汚染物質の光化学反応を研究するとき、Kモデルという渦拡散モデルを用いた。汚染物質の濃度をCとするとその輸送方程

式は次のようになる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \rho K \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{C}{\rho} \right) \right] + P - LC \quad (1)$$

ここで $\rho$ は空気の密度、Kは渦拡散率、PとLCは化学反応による生産と損失の項である。対流が活発な昼間の大気境界層のKの鉛直分布は境界層の代表速度 $w^*$ と境界層の高さ $z_i$ を使って

$$K = 2.5w^*z_i(1-z/z_i)(z/z_i)^{3/2} \quad (2)$$

と与えられる。ただし速度 $w^*$ は

$$w^* = [(g/T)\langle w'T \rangle z_i]^{1/3} \quad (3)$$

と定義される。(gは重力加速度、Tは境界層の平均温度、 $\langle w'T \rangle$ は地表面の熱フラックスである。)大気境界層では乱流エネルギーや熱フラックスなどの乱流統計量は $w^*$ と $z_i$ で正規化すると鉛直分布が相似になることが知られている。(2)の分布はLES<sup>5)</sup>のデータから得られたものである。境界層より上の層も含めたKの鉛直分布<sup>4)</sup>を図2に示す。

(1)のKモデルは工学の分野でよく用いられるk-εモデルと同じように渦拡散近似を使ったモデルである。このKモデルとk-εモデルとの違いは前者は渦拡散率の空間分布があらかじめ与えられているのに対して、後者は渦拡散率はその地点での統計量(乱流エネルギーとその散逸率)でモデル化されている点である。昼間の境界層だけに適用する場合は(2)を用いればよいが、夜間の境界層や他の

\*東京大学生産技術研究所 第1部

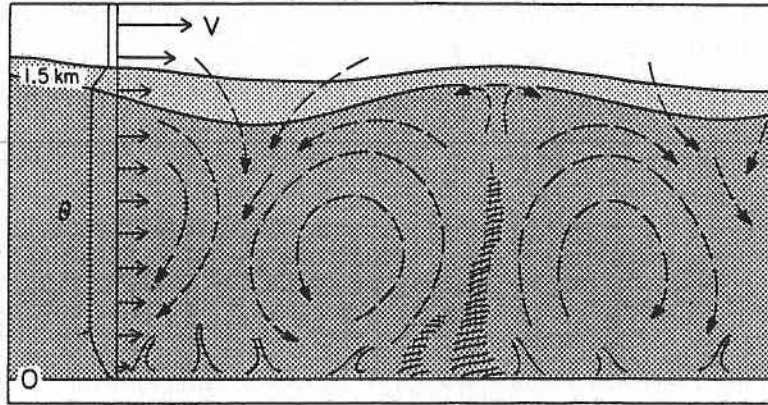


図 1 大気境界層の模式図<sup>1)</sup>

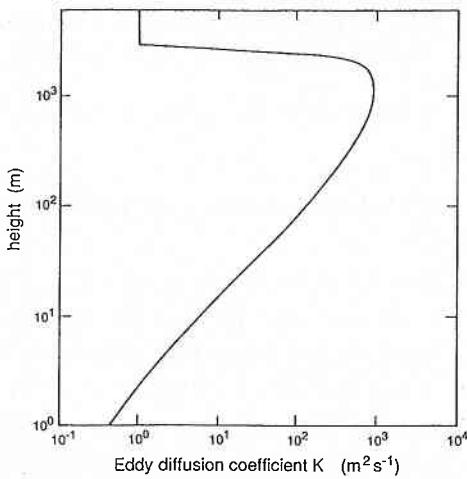


図 2 渦拡散率の鉛直分布<sup>4)</sup>

大気層に適用する場合は別の分布を求めるか k-ε モデルのように局所的な統計量でモデル化する必要がある。

McKeen et al.<sup>6)</sup> は米国東部のオゾン生成と輸送を研究するときに昼間の境界層の拡散モデルとして次のような非局所的なモデルを用いた。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = m (C_a - C) \quad (4)$$

ただし、m は混合の程度を表すパラメーター、C<sub>a</sub> は地表に近い高さでの濃度の値である。このモデルの模式図<sup>7)</sup> を図 3 に示す。これは化学反応をしない物質の濃度分布は境界層中ではほぼ一定になることを利用したもので、図 3 の P は濃度の時間発展が正の部分、N は負の部分を表す。図の右側の矢印は高さ z<sub>a</sub> にある流体が対流で上部に運ばれて物質の混合が行われるようすを示す。(4) は乱流モデルとしては単純なものではあるが、高さ z の濃度 C の時間発展に高さ z<sub>a</sub> の濃度 C<sub>a</sub> が寄与するとして、境界層中の拡散を大局的にとらえていることが特徴的である。境界層の対流の渦の大きさは最大で境界層の高度に達するものもあ

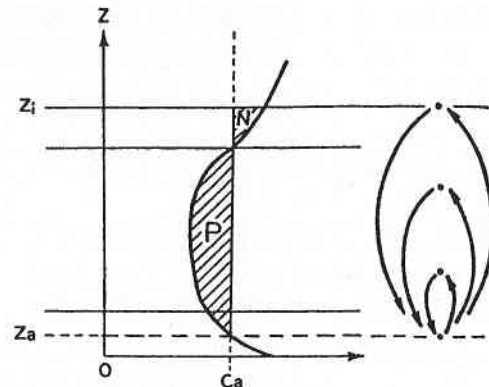


図 3 式 (4) のモデルの模式図<sup>7)</sup>

り、K モデルのように濃度のフラックスを一点の濃度勾配という局所的な量だけでは表せないという考え方である。Pleim and Chang<sup>8)</sup> も同様なモデルを考察している。Fiedler and Moeng<sup>9)</sup> は次のような空間積分を用いたモデルを提案している。

$$\frac{\partial C(z)}{\partial t} = \frac{w^*}{z_i^2} \int R\left(\frac{z}{z_i}, \frac{z'}{z_i}\right) [C(z') - C(z)] dz' \quad (5)$$

ここで R は無次元関数で、高さ z' の流体が急速な対流により高さ z の拡散に与える影響を表す。また LES のデータを用いて拡散の非局所性を定量的に評価する試みもある<sup>10)</sup>。これらの非局所性に関する考察は別の機会にゆずり、本研究では(1)の K モデルに着目しその改良を試みる。

### 3. 化学反応効果による K モデルの改良

化学反応の例として NO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> の反応を考える<sup>11)</sup>。



ここで  $j, k$  は反応速度である。また  $O_2$  の濃度は他の 3 つの濃度に比べて圧倒的に大きいので考えなくてよい。NO,  $NO_2$ ,  $O_3$  の濃度をそれぞれ  $C_A, C_B, C_C$  とする。大気境界層は水平方向が統計的に一様であると仮定し、水平面で平均をとると平均濃度の方程式は

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \langle w'c'_i \rangle + Q_i \quad (i = A, B, C) \quad (8)$$

$$Q_A = -Q_B = Q_C = jC_B - kC_A C_C \quad (9)$$

となる。ここで  $C_i$  と  $c'_i$  は  $i$  番目の物質の平均濃度と乱れ濃度、 $w'$  は乱れ速度の鉛直成分である。 $Q_i$  は化学反応による濃度の増減を意味する。(9) で乱れ濃度の相関  $\langle c'_A c'_C \rangle$  は平均濃度の積  $C_A C_C$  に比べて小さいとして無視した。(8) の濃度フラックス  $\langle w'c'_i \rangle$  がモデル化するべき項として残る。K モデルでは

$$\langle w'c'_i \rangle = -K \frac{\partial C_i}{\partial z} \quad (10)$$

とモデル化される。渦拡散率  $K$  は(2)と同様に  $w^*$  と  $z_i$  で正規化し鉛直分布を LES<sup>12)</sup> のデータを用いて決める。このモデルの欠点はその物質の渦拡散率も同じ値になり、化学反応による渦拡散率の変化が取り入れられないことである。

一方 2 次のクロージャーモデルは濃度フラックスの時間発展の式を扱い、それに含まれる濃度と速度の 3 体相関などの高次の項をモデル化する。K モデルと 2 次のモデルの化学反応項の違いを見るため、反応項以外の項は簡単なモデルを用いると次のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle w'c'_i \rangle = -\frac{K}{\tau} \frac{\partial C_i}{\partial z} - \frac{\langle w'c'_i \rangle}{\tau} + R_i \quad (11)$$

$$R_A = -R_B = R_C = j \langle w'c'_R \rangle - k C_A \langle w'c'_C \rangle - k C_C \langle w'c'_A \rangle \quad (12)$$

ここで  $\tau$  は圧力と濃度の相関項から得られる時間スケールを表し、 $K$  と同様に  $w^*$  と  $z_i$  で正規化され鉛直分布を LES のデータを用いて得られる。(11) からわかるように濃度フラックスは  $R_i$  を通して明らかに化学反応の影響を受けている。(10) の K モデルのように化学反応に依存しない渦拡散率では不十分であることが示唆される。

そこで乱流の統計理論による解析結果<sup>13)</sup>を用いて K モデルを次のように修正する。

$$\langle w'c'_i \rangle = -K \frac{\partial C_i}{\partial z} + S_i \quad (13)$$

$$S_A = -S_B = S_C = K_1 \left( -j \frac{\partial C_B}{\partial z} + k C_A \frac{\partial C_C}{\partial z} + k C_C \frac{\partial C_A}{\partial z} \right) \quad (14)$$

ここで  $S_i$  は濃度フラックスの修正項で、係数  $K_1$  は

$$K_i = K / (\tau^{-1} + j + k C_A + k C_C) \quad (15)$$

とモデル化される。(14) で  $S_A$  を考えると、右辺の  $\partial C_A / \partial z$  を含む項は渦拡散率が化学反応によって変わる効果を表し、 $\partial C_B / \partial z, \partial C_C / \partial z$  を含む項は化学反応による相互拡散の効果を表す。相互拡散とは物質 A の濃度フラックスが他の物質 B, C の濃度勾配に依存する効果である。この化学反応では(13)–(15)の修正 K モデルは(11), (12)の 2 次のモデルの定常解になっている。反応が複雑になると厳密解ではなく近似解になる。<sup>11)</sup>

K モデル、修正 K モデル、2 次のモデルを用いて、 $z = 80m$  から  $z = 1200m$  の間で 1 次元の数値計算を行った。上部の境界では濃度フラックスを 0 とし、下部の境界では濃度を固定し  $C_A = 1$  ppbv (parts per billion by volume),  $C_B = 4$  ppbv,  $C_C = 40$  ppbv と置いた。また反応速度は

$$j = 4 \times 10^{-3} s^{-1}, \quad k = 4 \times 10^{-4} [1 - (z(m) - 80) / 5600] ppbv^{-1} s^{-1} \quad (16)$$

とした。適当な初期値から出発し、定常状態になるまで時間発展させた。

図 4 は濃度  $C_A$  の鉛直分布である。修正 K モデルは 2 次のモデルと一致している。また K モデルもずれは小さい。(8)の右辺の各項の大きさを評価すると濃度フラックスを含む第 1 項よりも  $Q_i$  中の 2 項の値が大きく、(9)の  $Q_i = jC_B - kC_A C_C \approx 0$  で濃度分布が決まることがわかった。したがって濃度フラックスのモデルの違いが濃度分布にあまり影響を与えていない。

図 5 は濃度フラックス  $\langle w'c'_A \rangle$  の鉛直分布である。修正 K モデルと 2 次のモデルはよく一致している。K モデルはそれらと大きくずれ、フラックスの大きさを過大評価している。これは(13)の修正項  $S_i$  が重要であることを示している。(14)の右辺の 3 項の大きさを評価すると  $\partial C_C / \partial z$  を含む項が大きな寄与をしていることがわかった。これは NO のフラックスが  $O_3$  の勾配によって引き起こされる相互拡散の効果の意味する。

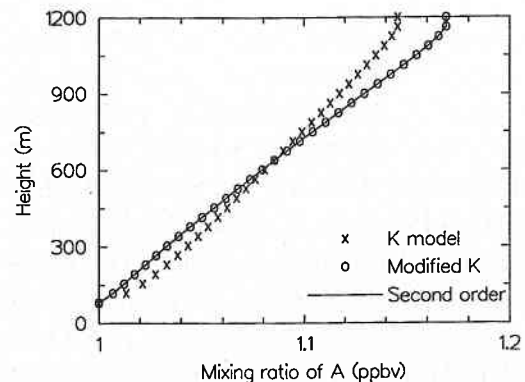


図 4 濃度  $C_A$  の鉛直分布

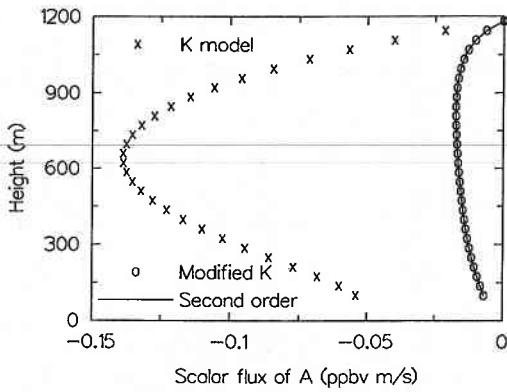


図5 濃度フラックス<w'c\_A'>の鉛直分布

4. 高次の項による K モデルの改良

前章の修正 K モデルは化学反応をしないスカラーに対しては K モデルと同じ式になる。しかし観測や LES の数値計算によると、温度などの通常のスカラーでも K モデルでは説明できない現象があることが知られている。ここではトップダウン・ボトムアップ拡散と逆勾配拡散の現象に着目し、K モデルを改良することによってそれらの説明を試みる<sup>14)</sup>。

4.1 トップダウン・ボトムアップ拡散

大気境界層中のスカラーフラックスの鉛直分布はほぼ直線で近似できることが知られている。そこで次の分布

$$\langle w'c \rangle = \langle w'c \rangle_1 z / z_i \tag{17}$$

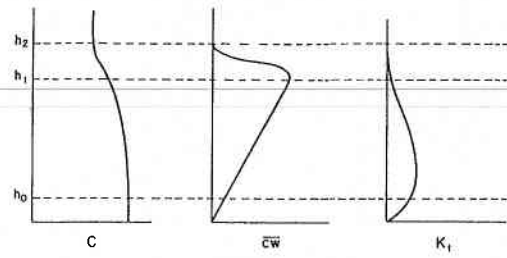
$$\langle w'c \rangle = \langle w'c \rangle_0 (1 - z / z_i) \tag{18}$$

( $\langle w'c \rangle_1$ は上部の境界でのフラックス、 $\langle w'c \rangle_0$ は地表面でのフラックスの値を表す) に対応するスカラーを  $c_t$ ,  $c_b$  とすると任意のスカラー分布は  $c_t$  と  $c_b$  の線形結合で表せることになる<sup>5)</sup>。添え字 t と b はトップダウンとボトムアップを意味する。それぞれの分布の模式図を図6に示す。上段がトップダウン、下段がボトムアップを表す。トップダウンは境界層の上の対流圏から物質が流入する現象に対応し、ボトムアップは地表面から境界層に物質が放出される現象に対応する。スカラーとそのフラックスの分布から渦拡散率を求めると  $K_t$  と  $K_b$  の分布が異なり、 $K_b$  の方が大きいことが知られている。(10)の K モデルで渦拡散率 K は乱流速度場から求まりスカラーの分布に依存しないとすると、 $K_t$  と  $K_b$  の違いを説明できない。

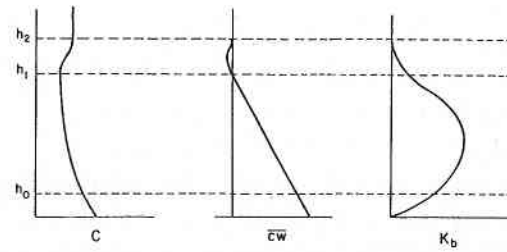
そこで乱流の統計理論を用いて次のように K モデルを修正する<sup>14)</sup>。

$$\langle w'c \rangle = -K \frac{\partial C}{\partial z} + K_2 \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \tag{19}$$

Top-Down Diffusion



Bottom-Up Diffusion



平均濃度 濃度フラックス 乱流拡散係数

図6 トップダウン・ボトムアップ拡散の模式図<sup>5)</sup>

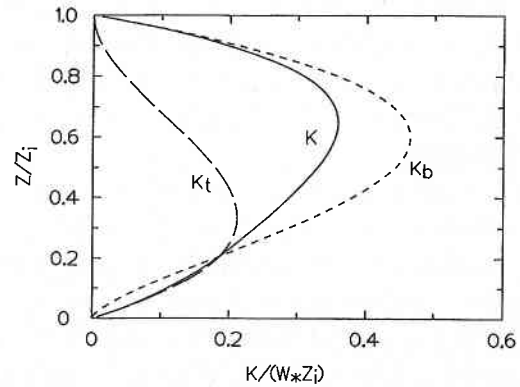


図7 係数K, K\_eff,t, K\_eff,bの鉛直分布

これはフラックスをスカラーの微分展開で表し、2次で打ち切ったものといえる。係数 K と  $K_2$  は乱流速度場から決まりスカラーの分布には依存しないが実効的な渦拡散率

$$K_{eff} = K - K_2 \left( \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} / \frac{\partial C}{\partial z} \right) \tag{20}$$

はスカラーの分布に依存することになる。図6からわかるようにトップダウンとボトムアップでは  $\partial^2 C / \partial z^2$  の符号が逆になり、トップダウンでは  $K_{eff,t}$  は K より小さくボトムアップでは  $K_{eff,b}$  は K より大きくなる。LES<sup>12)</sup> で得られたスカラーとフラックスの分布を(19)と(20)に代入して K,  $K_{eff,t}$ ,  $K_{eff,b}$  の分布を求めたものが図7、 $K_2$  の分布が図8である。図7を見ると、 $z/z_i > 0.2$  では上述のとおりだが、 $z/z_i < 0.2$  では  $K_{eff,t}$  と  $K_{eff,b}$  はほぼ等しく、わずかではあ

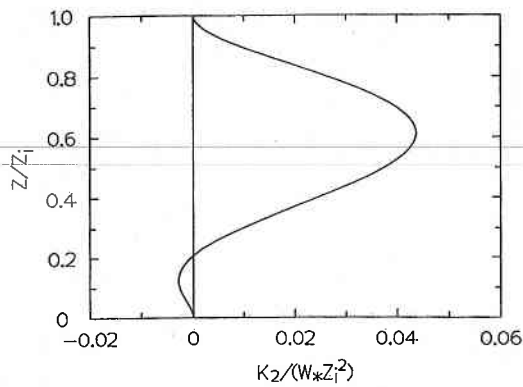


図8 係数K<sub>2</sub>の鉛直分布

るが大小関係が逆になっている。これは図8でわかるように  $z/z_i < 0.2$  で  $K_2$  が負になっているためである。

(17)と(18)のトップダウンとボトムアップ拡散の違いは境界層全体を見たときの拡散の型の違いであり非局所的な現象である。(19)の修正Kモデルはスカラーについて局所的な量で表されたモデルではあるが非局所的な効果を一部取り入れていると解釈できる。たとえば非局所的なモデル(5)を考えると右辺の  $C(z)$  を  $z$  のまわりでテイラー展開したとき2階微分だけを残した場合がKモデルにほぼ対応し[(1)を参照]、3階微分まで残した場合が修正Kモデルにほぼ対応している。したがってKモデルより修正Kモデルの方が非局所性をより多く取り入れているといえる。

4.2 逆勾配拡散

図9にLES<sup>12)</sup>によるボトムアップのスカラーの分布を示す。(18)からわかるようにフラックスは全領域で正である。スカラーの勾配はたいいていの領域で負であるが、上部の境界近くで正になっている。そこでは(10)のKモデルの渦拡散率  $K$  が負になってしまい非物理的である。通常はスカラーが減少する方向にフラックスが流れる。上部の境界近くのようにスカラーが増加する方向にフラックスが流れる現象を逆勾配拡散 (counter-gradient diffusion) と呼ぶ。Deardorff<sup>15)</sup>は次のようなKモデルの修正を提案した。

$$\langle w'c' \rangle = -k \left( \frac{\partial C}{\partial z} - \gamma \right) \tag{21}$$

ここで  $\gamma$  は逆勾配拡散項である。(19)の修正Kモデルを使うと  $\gamma$  は

$$\gamma = \frac{K_2}{K} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \tag{22}$$

と表されることがわかる。

ここでフラックスが  $\langle w'c' \rangle = \langle w'c' \rangle_0 (1 - 1.2z/z_i)$  の場合を考える。これはトップダウンとボトムアップのスカラーを  $-0.2:1$  で重ね合わせた場合で、典型的な大気境界層の熱フラックスの分布である。図10はスカラー勾配

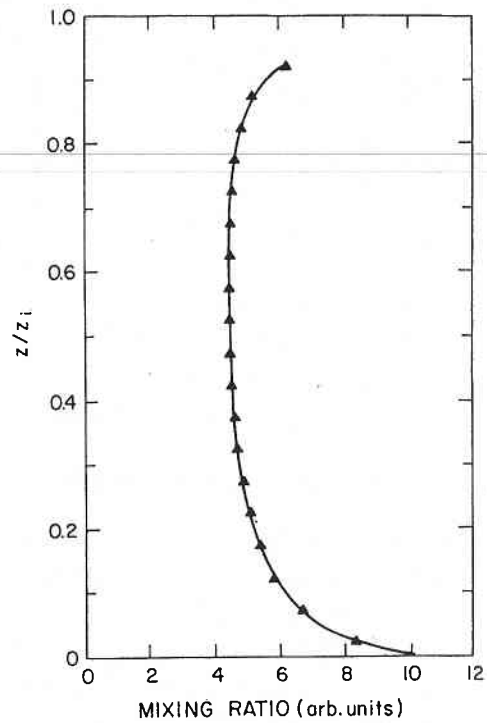


図9 ボトムアップのスカラーの鉛直分布<sup>12)</sup>

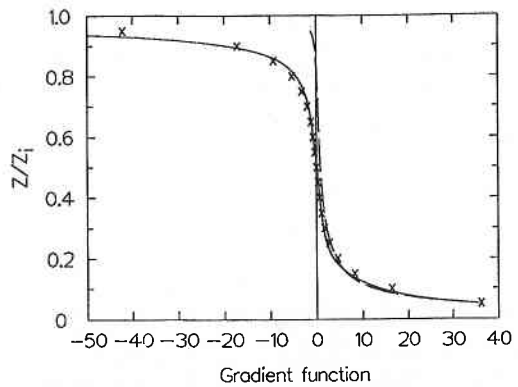


図10 スカラー勾配 ( $-\partial C/\partial z$ ) の鉛直分布 (×はLES, 実線は修正Kモデル, 破線はKモデル)

( $-\partial C/\partial z$ ) の鉛直分布で、×はLES、実線は修正Kモデル、破線は  $K_b$  を用いたKモデルの結果である。修正KモデルはLESの結果をよく再現できることがわかる。一方Kモデルは境界層の下半分ではLESと一致しているが上部の境界近くでは絶対値が小さく、ずれが大きい。

4.3 係数K, K<sub>2</sub>のモデリング

今までは係数K, K<sub>2</sub>の分布はLESのスカラーの分布から求めたものを使った。熱対流が支配的な昼間の大気境界層では乱流統計量の分布に相似性があることが知られているので、それだけにモデルを適用する場合は係数の分布をあらかじめ固定してかまわない。しかし普遍的なモデルを作り、その他の大気層や工学の浮力下の乱流場に適用するには係数のモデル化が必要である。乱流の統計理論を用

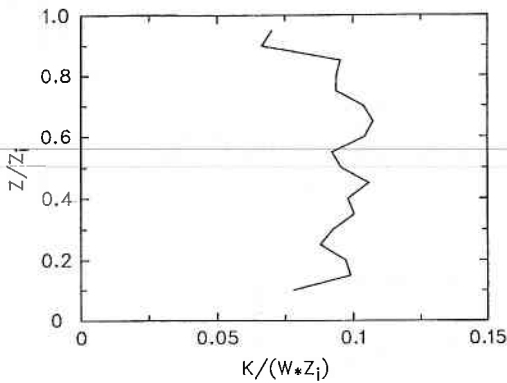


図11 係数 K の鉛直分布

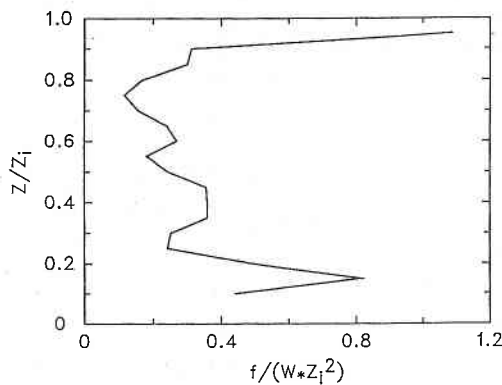


図12 f の鉛直分布

いと K と K<sub>2</sub> のモデルは最低次では

$$K = C_1 \frac{k^2}{\epsilon} \tag{23}$$

$$K_2 = -C_2 \frac{k^4}{\epsilon^3} \frac{\partial k}{\partial z} \tag{24}$$

となる。ここで C<sub>1</sub>, C<sub>2</sub> はモデル定数で C<sub>1</sub> = 0.13, C<sub>2</sub> の値はまだ求まっていない。LES で得られた乱流エネルギー k とその散逸率 ε の分布を用いて (23) と (24) の C<sub>2</sub> を除いた部分

$$f = \frac{K_2}{C_2} = -\frac{k^4}{\epsilon^3} \frac{\partial k}{\partial z} \tag{25}$$

の鉛直分布を図11と図12に示す。まず図11の K の分布を図7と比べると値が小さく約 1/3 であることがわかる。定数 C<sub>1</sub> を大きくするか、(23) に新たな項を付け加える必要がある。次に図12の f (= K<sub>2</sub>/C<sub>2</sub>) の分布を図8と比べると上下の境界近くで値が大きく、定性的にあっていない。中心部で値を合わせると定数 C<sub>2</sub> は 0.1 のオーダーであることがわかる。図11, 図12の分布の揺らぎからわかるように LES から得られた k と ε の分布はやや信頼性が少ないが、それだけでは分布の不一致は説明できない。大気境界層の

乱流は浮力が重要であるので(23)と(24)に浮力の効果を直接表す項を追加する必要があると思われる。

### 5. ま と め

最初に大気汚染物質輸送の数値計算で用いられているスカラー拡散のモデルを紹介した。工学で用いられる k-ε モデルと似ている K モデルや非局所的なモデルについて説明した。次に K モデルに化学反応の効果を取り入れて改良した。NO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> の反応について濃度の拡散を計算し、K モデル, 修正 K モデル, 単純化された 2 次のクロージャーモデルの 3 つの結果を比較した。修正 K モデルは 2 次のモデルとよく一致すること, K モデルは濃度フラックスを過大評価することがわかった。最後にスカラーの 2 階微分を用いて K モデルを改良した。トップダウン・ボトムアップ拡散と逆勾配拡散の現象を説明した。係数 K, K<sub>2</sub> のモデルはまだ不十分であることがわかった。

今後の課題は、精密な LES を行い信頼性の高い乱流統計量を求めて係数 K, K<sub>2</sub> のモデルを改良すること, 化学反応の LES を行い 3 章の修正 K モデルの検証を行うこと, 大気境界層以外の浮力下の乱流場に適用することなどである。また LES で大気境界層の拡散の非局所性を考察し、その観点から K モデルを改良することも重要であると思われる。

(1993年10月18日受理)

### 参 考 文 献

- 1) J. C. Wyngaard: Annu. Rev. Fluid Mech. **24** (1992) 205.
- 2) G. L. Mellor and T. Yamada: Rev. Geophys. Space Phys. **20** (1982) 851.
- 3) F. T. M. Nieuwstadt, P. J. Mason, C. H. Moeng, and U. Schumann: Proc. 8th Symp. on Turbulent Shear Flows (1991) pp. 1-4-1.
- 4) M. Trainer, E. Y. Hsie, S. A. McKeen, R. Tallamraju, D. D. Parrish, F. C. Fehsenfeld, and S. C. Liu: J. Geophys. Res. **92** (1987) 11879.
- 5) J. C. Wyngaard and R. A. Brost: J. Atmos. Sci. **41** (1984) 102.
- 6) S. A. McKeen, E. Y. Hsie, M. Trainer, R. Tallamraju, and S. C. Liu: J. Geophys. Res. **96** (1991) 10809.
- 7) D. Zhang and R. A. Anthes: J. Appl. Meteor. **21** (1982) 1594.
- 8) J. E. Pleim and J. S. Chang: Atmos. Environ. **26A** (1992) 965.
- 9) B. H. Fiedler and C. H. Moeng: J. Atmos. Sci. **42** (1985) 359.
- 10) 半場: 第7回数値流体力学シンポジウム, p. 257.
- 11) F. Hamba: J. Geophys. Res. **98** (1993) 5173.
- 12) C. H. Moeng and J. C. Wyngaard: J. Atmos. Sci. **41** (1984) 3161.
- 13) F. Hamba: J. Phys. Soc. Jpn. **56** (1987) 79.
- 14) F. Hamba: J. Atmos. Sci. **50** (1993) 2800
- 15) J. W. Deardorff: J. Atmos. Sci. **23** (1966) 503.