

第 2 章 移流拡散モデル

本章では、ラグランジュモデルである ATM の定式化として力学・物理過程の時間変化率と時間積分法、空間内挿法および出力について記述する。

2.1 定式化の準備

ラグランジュモデルである ATM の目的は、大気場に放出された N_t 個の計算粒子（トレーサー）の時刻 t における位置ベクトル

$$\mathbf{r}_n(t) = (\lambda_n(t), \varphi_n(t), z_n(t)) \quad (n = 1, 2, \dots, N_t) \quad (2.1)$$

の時間発展を求めることである。ただし $0^\circ \leq \lambda_n < 360^\circ$ は経度、 $-90^\circ \leq \varphi_n \leq 90^\circ$ は緯度、 z_n は鉛直上向きを正とする地球表面からの高度（海拔）である。水平方向は、 \mathbf{r}_n において東向きおよび北向きを正とする局所直交座標 (x_n, y_n) を取れば、

$$(dx_n, dy_n) = (R_E \cos \varphi_n d\lambda_n, R_E d\varphi_n) \quad (R_E : \text{地球半径}) \quad (2.2)$$

の関係が成り立つ¹。水平輸送されるトレーサーは受動的トレーサー（パッシブトレーサー）とし、トレーサー自体の運動は鉛直方向に働く重力と浮力、空気抵抗力のみを考慮して、以下の仮定を置く。

- (i) 大気場の風ベクトル $\mathbf{U}(\mathbf{r}_n) = (U_n, V_n, W_n)$ で輸送²
- (ii) 鉛直風速 W_n に対する相対的な終端速度 w_{tn} で落下³
- (iii) トレーサー間は相互作用しない⁴

すると、 n 番目のトレーサーについての運動論的方程式⁵は

$$\frac{D\mathbf{r}}{Dt} = \mathbf{U} - w_t \hat{\mathbf{z}} = (U, V, W - w_t) \quad (2.3)$$

となる。さらに風を平均 $\bar{\mathbf{U}} = (\bar{U}, \bar{V}, \bar{W})$ とゆらぎ $\mathbf{U}' = (U', V', W')$ の和 $\mathbf{U} = \bar{\mathbf{U}} + \mathbf{U}'$ にレイノルズ分解して、(2.3) 式を十分小さい積分時間間隔（タイムステップ） Δt でテイラー展開すると

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \bar{U}\Delta t + U'\Delta t + O((\Delta t)^2) \quad (2.4a)$$

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \bar{V}\Delta t + V'\Delta t + O((\Delta t)^2) \quad (2.4b)$$

$$z(t + \Delta t) = z(t) + \bar{W}\Delta t + W'\Delta t - w_t\Delta t + O((\Delta t)^2) \quad (2.4c)$$

と書ける（例えば、Stohl, 1998; Lin, 2012）。(2.4) 式の右辺第 2 項は輸送項、第 3 項は拡散項、(2.4c) 式の右辺第 4 項は降下項である。

数値予報モデルによる時間発展の計算は、原 (2012) が述べているとおり、

¹本書では簡単のため、度数法から弧度法への変換因子 $\pi/180$ は省略する。

²トレーサーの初速度が大きい場合、例えば水平方向についてはトレーサーの速度 $(dx_n/dt, dy_n/dt)$ が (U_n, V_n) に漸近するまでの緩和時間が長くなるため、この仮定は成り立たない。

³鉛直流のトレーサーへの作用 dW_n/dt が重力や抵抗力に比べて小さいとみなせれば、この仮定が成り立つ。

⁴この仮定の下、トレーサーを識別する添字 n は以下省略する。

⁵運動方程式に基づく定式化は今後の課題（第 7 章）。

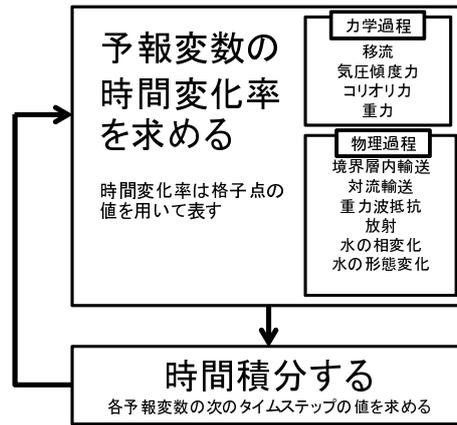


Figure 2.1 Basis of NWP model (from Figure 1.2.1 of Hara (2012))

1. 各予報変数 ϕ_i の過程 k による時間変化率 $f_i^k (\equiv \partial\phi_i(t)/\partial t|_k)$ を各過程ごとに独立に求めること
2. (全過程の時間変化率) $F_i = \sum_k f_i^k$ を用いて時間積分を行い、 Δt 後の各予報変数の値を求めること

が基本であり (Figure 2.1)、ラグランジュモデルの ATM も然りである。すなわち ATM の場合、予報変数 ϕ_i は (2.1) 式のトレーサーの位置 λ, φ, z であり、考慮する過程 k は (2.4) 式に対応した輸送、拡散、重力落下のほか、乾性および湿性沈着過程などがある。第 2.2 節の各項では ATM でこれらの時間変化率を求める方法について、(2.4) 式より高次の時間積分法については第 2.3 節で述べる。

2.2 力学・物理過程の時間変化率

本節では、大気輸送の素過程のうち ATM に実装している輸送⁶、拡散、重力落下⁷、乾性および湿性沈着過程の時間変化率を求める方法について述べる。これらは付録 A に示すディレクトリツリーの Process にある個々のモジュールで計算される。各過程の物理については、各項で引用する文献および新堀・他 (2010, 2014) を参照されたい。

2.2.1 輸送過程

局所直交座標

輸送過程の時間変化率は、第 2.1 節の仮定 (i) の下、(2.4) 式の右辺第 2 項に表されているとおり、大気場の平均風で与えられる。極座標表示の局所直交座標 (2.2) 式を (2.4) 式に代入して右辺第 2 項の時間変化率を取り出すと

$$f_{\lambda}^{\text{adv}} = \frac{\bar{U}}{R_E \cos \varphi} \quad (\varphi \neq \pm 90^\circ) \quad (2.5a)$$

$$f_{\varphi}^{\text{adv}} = \frac{\bar{V}}{R_E} \quad (2.5b)$$

$$f_z^{\text{adv}} = \bar{W} \quad (2.5c)$$

となる (例えば、Takasugi and Nakamura, 1988)。

球面三角形

水平輸送経路の地球の曲率を考慮する場合は、GATM (Iwasaki *et al.*, 1998) をはじめ実装されていた、球面三角法を用いる。すなわち Figure 2.2 において、水平風ベクトル $\bar{U}_h = (\bar{U}, \bar{V})$ がタイムステップ Δt になす大円弧を一辺とする球面三角形 PSD に、球面三角法 (例えば、森口・他, 1957; 多田, 1997; 河瀬, 2019) を適用して、

⁶慣用では移流過程と呼ばれる。

⁷別名では降下過程と呼ばれる。

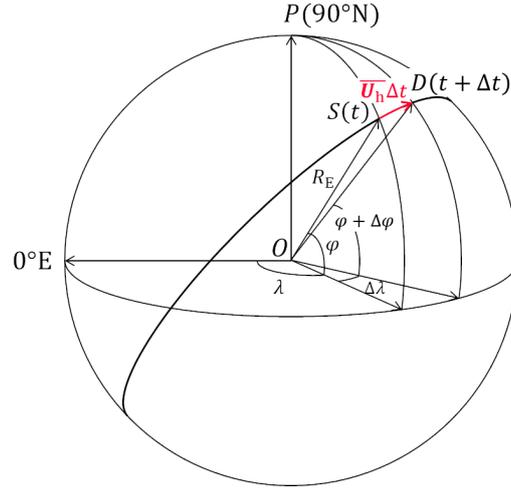


Figure 2.2 Advection sphere. $S(t, \lambda, \varphi)$, $D(t + \Delta t, \lambda + \Delta \lambda, \varphi + \Delta \varphi)$ are the tracer points before/after transport by horizontal wind \overline{U}_h within a time step Δt and R_E is the Earth radius.

$$f_{\lambda}^{\text{hadv}} = \frac{\angle DPS}{\Delta t} \quad (2.6a)$$

$$f_{\varphi}^{\text{hadv}} = \frac{(\angle R - \angle POD) - \varphi}{\Delta t} \quad (2.6b)$$

ただし $\angle R$ は直角を表し、 $\angle DPS$ と $\angle POD$ はそれぞれ正弦定理と余弦定理から

$$\begin{aligned} \sin \angle DPS &= \sin \angle SOD \frac{\sin \angle PSD}{\sin \angle POD} \\ &= \sin \left(\frac{|\overline{U}_h| \Delta t}{R_E} \right) \frac{\overline{U}}{|\overline{U}_h|} / \sin \angle POD \end{aligned} \quad (2.7a)$$

$$\begin{aligned} \cos \angle POD &= \cos \angle POS \cos \angle SOD + \sin \angle POS \sin \angle SOD \cos \angle PSD \\ &= \cos (\angle R - \varphi) \cos \left(\frac{|\overline{U}_h| \Delta t}{R_E} \right) + \sin (\angle R - \varphi) \sin \left(\frac{|\overline{U}_h| \Delta t}{R_E} \right) \frac{\overline{V}}{|\overline{U}_h|} \\ &= \sin \varphi \cos \left(\frac{|\overline{U}_h| \Delta t}{R_E} \right) + \cos \varphi \sin \left(\frac{|\overline{U}_h| \Delta t}{R_E} \right) \frac{\overline{V}}{|\overline{U}_h|} \end{aligned} \quad (2.7b)$$

で求める⁸。

ATM の輸送過程の計算方法は Table D.11 で切り替える。輸送過程の単体試験の比較を Figure 2.3 に示す。タイムステップが短い極限では (2.5a), (2.5b) 式と (2.6a), (2.6b) 式は一致するが、タイムステップが長くなるとこれらの時間変化率の計算法よりも時間積分法 (第 2.3.1 項) の違いの方が予測精度に与える効果が大きくなると考えられる。

2.2.2 拡散過程

拡散過程は、ATM では水平拡散と鉛直拡散に分け、トレーサーの放出時間を考慮する水平拡散係数は ATM 本体で計算し、大気場から診断している鉛直拡散係数は前処理 GPV を使用する。

⁸ $|\overline{U}_h| \Delta t / R_E \ll 1$ ならば、 $\sin \angle DPS \approx \overline{U} \Delta t / R_E \sin \angle POD$, $\cos \angle POD \approx \sin \varphi + \overline{V} \Delta t \cos \varphi / R_E$.

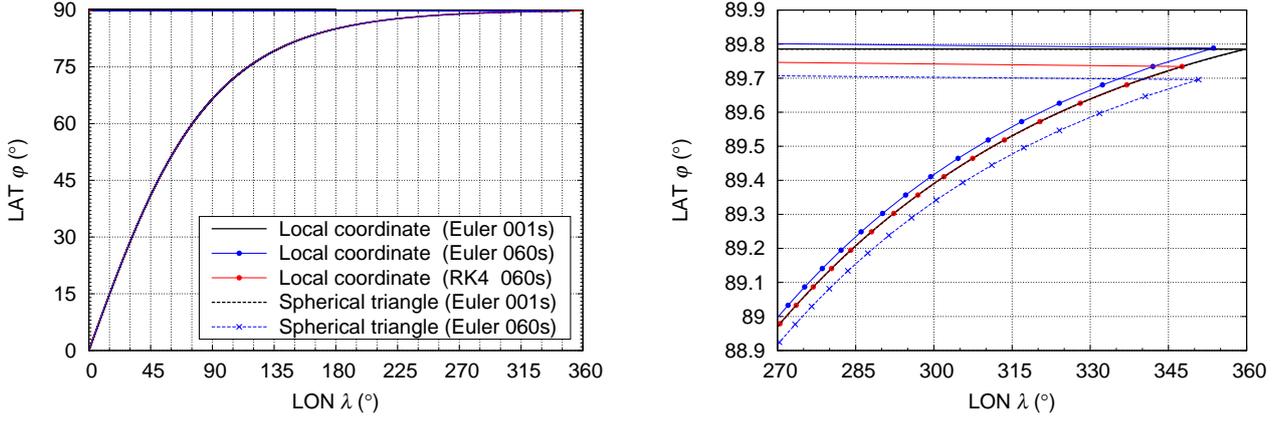


Figure 2.3 Comparison of horizontal advection. Single tracer trajectory by the ATM calculation with only horizontal advection process. Input GPV is ideal of $U = 100$ m/s and $V = 100$ m/s uniformly. Emission point is 0°N , 0°E . Solid and dotted trajectories are calculated by Equations (2.5) and (2.6), respectively. Right figure shows an enlarged near high latitude of the left one. Plots are at each time step of $\Delta t = 60$ s by Euler or Runge-Kutta (RK4) method ($\Delta t = 1$ s are as references).

(1) 水平拡散

拡散方程式

水平拡散の時間変化率 f_λ^{hdif} , f_ϕ^{hdif} は、(2.4a), (2.4b) 式の右辺第 3 項に表されているとおり、水平風速のゆらぎから与えられる。最も簡明なゆらぎの表現は、水平拡散係数を K_h とする拡散方程式との類比⁹から、

$$U' = \sqrt{\frac{2K_h}{\Delta t}}\Gamma, \quad V' = \sqrt{\frac{2K_h}{\Delta t}}\Gamma \quad (2.8)$$

で与えられる (例えば、Iwasaki *et al.*, 1998)。ここで Γ は平均 0、標準偏差 1 の正規乱数 (付録 G) である。しかし上式には、物質が放出されてからの経過時間 t に関する情報が含まれていない。

ランジュバン方程式

そこで (2.8) 式に代わり、RATM (Kawai, 2002) をはじめ実装されていたように、ランジュバン方程式 (Gifford, 1982, 1984) に基づき、風速ゆらぎは自己相関をもつ成分とランダムな成分の和

$$U'(t) = R_{U'}(\Delta t)U'(t - \Delta t) + \sqrt{1 - R_{U'}(\Delta t)^2} \sigma_{U'}\Gamma \quad (2.9a)$$

$$V'(t) = R_{V'}(\Delta t)V'(t - \Delta t) + \sqrt{1 - R_{V'}(\Delta t)^2} \sigma_{V'}\Gamma \quad (2.9b)$$

ただし

$$U'(0) = U'_0\Gamma, \quad V'(0) = V'_0\Gamma$$

で与える。ここで U'_0, V'_0 は放出時点の風速ゆらぎの大きさ、 U', V' の自己相関係数 $R_{U'}, R_{V'}$ は緩和時間 (ラグランジュの時間スケール) を t_{Lh} として、

$$R_{U'}(\Delta t) = R_{V'}(\Delta t) = e^{-\Delta t/t_{Lh}} \quad (2.10)$$

それらの標準偏差は

$$\sigma_{U'} = \sigma_{V'} = \sqrt{\frac{K_h}{t_{Lh}}} \quad (2.11)$$

⁹フィック型拡散と呼ばれる。

である (例えば、Uliasz, 1990; Baumann and Schlager, 2012)。

$f_{\lambda}^{\text{hdif}}, f_{\varphi}^{\text{hdif}}$ は、(2.5a), (2.5b) 式または (2.6a), (2.6b) 式において、 \bar{U}, \bar{V} の代わりに (2.8) 式または (2.9) 式による \bar{U}', \bar{V}' を代入して求める。

ATM の水平拡散の計算方法は Table D.3 で設定する。水平拡散の単体試験の比較を Figures 2.4, 2.5 に示す¹⁰。 K_h の設定値によっては、(2.9) 式による水平拡散は、特に放出直後の広がりが抑えられる。

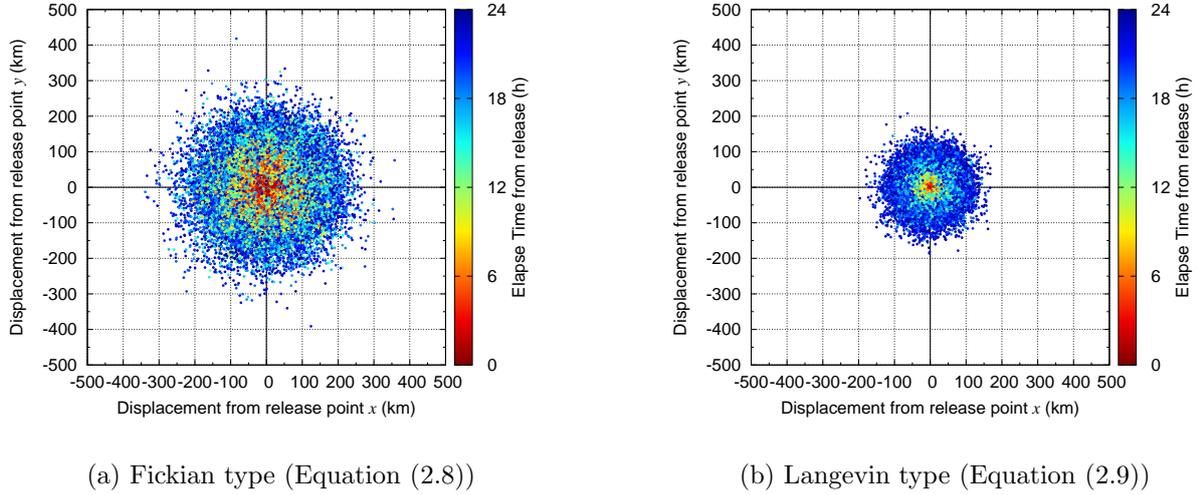


Figure 2.4 Comparison of horizontal diffusion (continuous emission). Tracer plots at FT = 24 h by the ATM calculation with only horizontal diffusion process of $\Delta t = 60$ s. Tracer positions are transformed from (λ, φ) to (x, y) on the plane rectangular coordinates (Kawase, 2011). All tracers are emitted continuously from the origin and emission rate is 1 tracer/s. Horizontal diffusion parameters are given $K_h = 5.0 \times 10^4$ m²/s, $t_{Lh} = 5.0 \times 10^4$ s and $U'_0 = V'_0 = 0$ m/s, as an example.

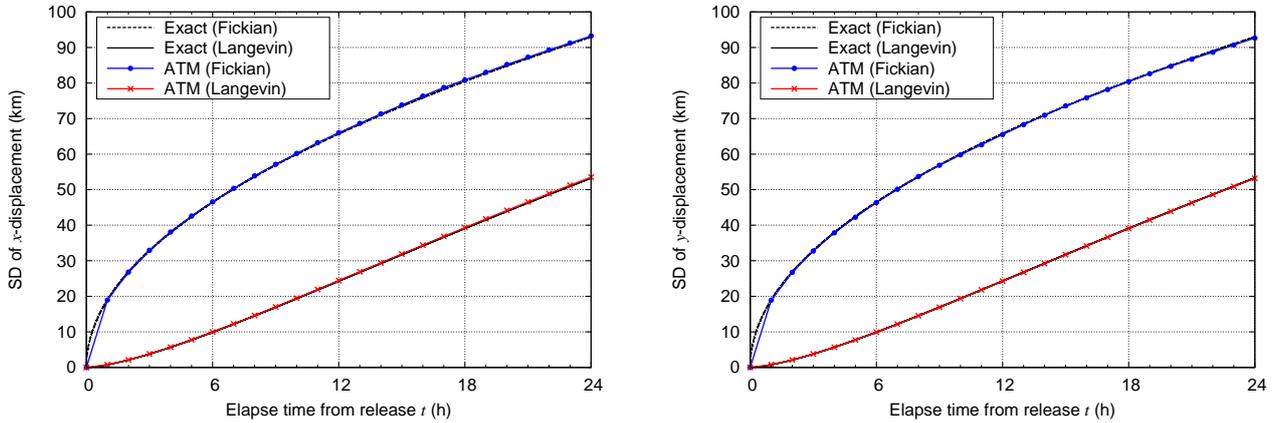


Figure 2.5 Comparison of horizontal diffusion (instantaneous emission). Standard deviation of tracer displacement of x - and y -direction by the ATM calculation with only horizontal diffusion process of $\Delta t = 60$ s. All tracers are emitted instantaneously at FT=0. Horizontal diffusion parameters are same as Figure 2.4. Black lines are exact solutions, blue and red lines are the ATM solutions by Equations (2.8) and (2.9), respectively.

¹⁰(2.8), (2.9) 式によるトレーサー変位の分散の厳密解はそれぞれ $\sigma_{x'}(t)^2 = 2K_h t$, $\sigma_{x'}(t)^2 = 2K_h t + (U'_0 t_{Lh})^2(1 - e^{-t/t_{Lh}})^2[1 - (K_h/U'_0{}^2 t_{Lh})(3 - e^{-t/t_{Lh}})/(1 - e^{-t/t_{Lh}})]$ ($\sigma_{y'}$ についても同様) で与えられる (Gifford, 1982)。

(2) 鉛直拡散

鉛直拡散の時間変化率 f_z^{vdif} は、(2.4c) 式の右辺第 3 項に表されているとおり、鉛直風速のゆらぎから与えられる。ゆらぎの表現は、前処理 GPV (第 4.1.6 項) の鉛直拡散係数 K_v を使用して、次式で与える。

$$f_z^{\text{vdif}} = W' = \frac{\sum' \sqrt{2K_v \Delta t' \Gamma'}}{\Delta t} \quad (\Delta t = \sum' \Delta t') \quad (2.12)$$

ただし $\Delta t' (\leq \Delta t)$ は、鉛直拡散による変位が過度に大きくならないようにするためのタイムステップの上限値であり (Iwasaki *et al.*, 1998)、Table D.3 で設定する。(2.12) 式の \sum' 内は (2.8) 式と同型である。

拡散過程の時間変化率 f_λ^{hdif} , f_φ^{hdif} , f_z^{vdif} はいずれの表式を用いてもタイムステップ依存性があることに注意する。

2.2.3 重力落下過程

重力落下過程の時間変化率は、第 2.1 節の仮定 (ii) の下、(2.4c) 式の右辺第 4 項に表されているとおり、トレーサーの終端速度から与えられる。

$$f_z^{\text{fall}} = -w_t \quad (2.13)$$

終端速度は、重力と浮力、空気抵抗のつり合いから

$$w_t(D, z) = \sqrt{\frac{4C_C (\rho_p - \rho_a) g D}{3C_a \rho_a}} \quad (g: \text{重力加速度}) \quad (2.14)$$

と書ける (例えば、Seinfeld and Pandis, 2016)。ここで D はトレーサーの粒径、 $\rho_p(D)$ はトレーサーのみかけ密度、 $\rho_a(z)$ は空気密度、 C_a は抵抗係数、 C_C はカニングガム補正係数である¹¹。 D と ρ_p の分布は初期値 (第 3 章) で与え、 ρ_a は前処理 GPV (第 4.1.5 項) を使用する。 C_a は、トレーサーに働く空気抵抗はトレーサーの物性に依拠して変化するため、ストークスと鈴木抵抗係数を導入している。

ストークスの抵抗係数

レイノルズ数 $Re \equiv wD/\nu_a$ ($\nu_a \equiv \eta_a/\rho_a$: 運動粘性率, η_a : 空気粘性率) が低い層流領域での球形トレーサーに対する空気抵抗は、ストークスの抵抗係数

$$C_a = \frac{24}{Re} \quad (2.15)$$

で与えられる。

鈴木抵抗係数

(2.15) 式を高レイノルズ数の乱流領域にある非球形トレーサーに拡張した空気抵抗として、火山灰を対象とした Suzuki (1983) の抵抗係数

$$C_a = \frac{24}{Re} F^{-0.32} + 2\sqrt{1.07 - F} \quad (2.16)$$

ただし F は Wilson and Huang (1979) の形状因子

$$F \equiv \frac{a_2 + a_3}{2a_1} \quad (a_1: \text{長軸}, a_2: \text{中軸}, a_3: \text{短軸の径}) \quad (2.17)$$

¹¹GATM, RATM では、(2.14) 式の分子において、重力と比べて浮力は無視できるとして $\rho_p - \rho_a \approx \rho_p$ と近似していた。また RATM では以前、 C_C は後出の C_a の表式において、その補正が有効となる (2.15) 式および (2.16) 式の右辺第 1 項のみに適用していた。

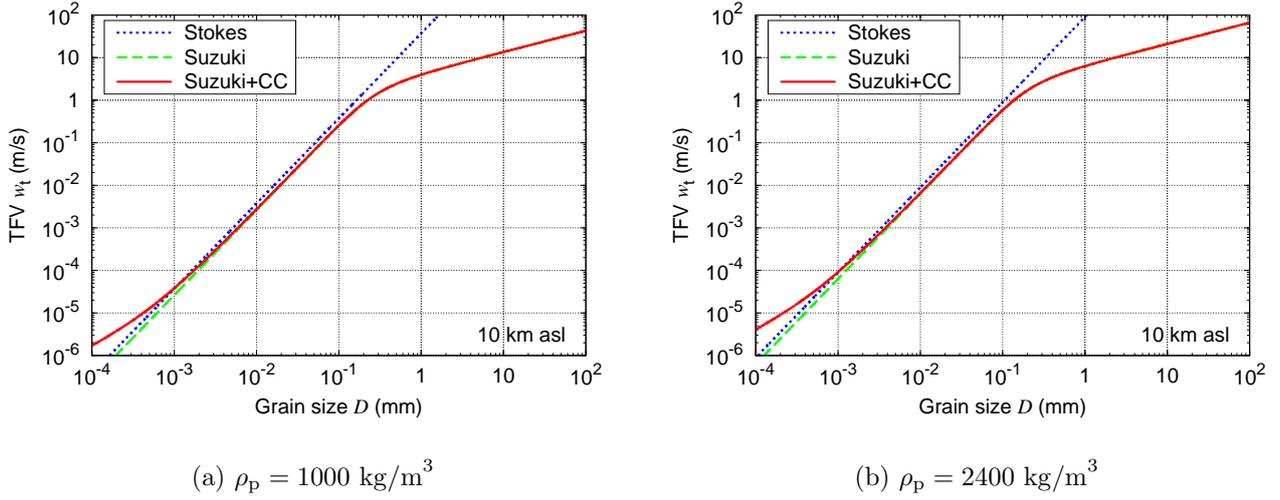


Figure 2.6 Comparison of terminal velocities in gravitational fallout process. All tracers are distributed at 10 km asl and input GPV is given by standard atmosphere (NOAA *et al.*, 1976). Blue dotted lines are Stokes' law, green dashed lines are Suzuki's law and red solid lines are Suzuki's law with Cunningham correction. Form factor of all tracers is set to $F = 1/3$ for Suzuki's law. (After Shimbori, 2016)

である（例えば、Folch, 2012; Bagheri and Bonadonna, 2016）。

また C_C は、クヌーセン数 $\text{Kn} \equiv 2\text{MFP}/D$ (MFP: 空気分子の平均自由行程) が $\gtrsim 1$ となる小さなトレーサーに対して必要なスリップ補正係数で

$$C_C = 1 + \text{Kn} \left[a + b \exp\left(-\frac{c}{\text{Kn}}\right) \right] \quad (a = 1.257, b = 0.400, c = 1.100) \quad (2.18)$$

で与えられる（例えば、水野, 2000; Seinfeld and Pandis, 2016）。

レイノルズ数を求めるのに必要な空気粘性率は、前処理 GPV（第 4.1.4 項）の気温 T を用いて

$$\eta_a(z) = \eta_0 \left[\frac{1 + C_S/T_0}{1 + C_S/T(z)} \right] \left[\frac{T(z)}{T_0} \right]^{1/2} \quad (C_S = 117 \text{ K: 空気に対するサザランド定数}) \quad (2.19)$$

クヌーセン数を求めるのに必要な MFP は、さらに前処理 GPV（第 4.1.3 項）の気圧 p を用いて

$$\text{MFP}(z) = \text{MFP}_0 \frac{\eta_a(z)}{\eta_0} \left[\frac{p(z)}{p_0} \right]^{-1} \left[\frac{T(z)}{T_0} \right]^{1/2} \quad (2.20)$$

で算出する。ここで基準となる粘性率および MFP は標準空気 ($p_0 = 1013.25 \text{ hPa}$, $T_0 = 293.15 \text{ K}$) のときの値 $\eta_0 = 18.18 \text{ } \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$, $\text{MFP}_0 = 0.0662 \text{ } \mu\text{m}$ を取っている（水野, 2000）。

ATM の重力落下過程における定数係数は Table C.3、計算方法は Table D.12 で設定する。重力落下の単体試験の比較を Figure 2.6 に示す。終端速度は、Figure 2.6 に図示したトレーサーの粒径や密度依存性のほか、トレーサーの形状や大気場の高度などに依存する。

2.2.4 乾性沈着過程

乾性沈着過程は、トレーサーの地表面からの高さを z' ($\equiv z - z_s$; z_s : トレーサー直下点のモデル標高)、接地層の厚さを L_r として、接地層内にあるトレーサーを対象とする。このうち、地表面へ付着するトレーサーを沈着確率

$$P_d = \begin{cases} \frac{V_d \Delta t}{L_r} & (z' \leq L_r) \\ 0 & (z' > L_r) \end{cases} \quad (2.21)$$

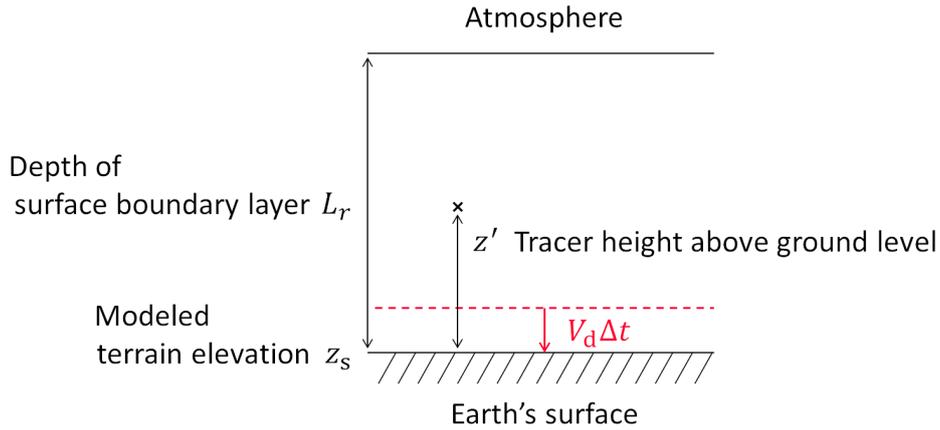


Figure 2.7 Dry deposition probability in a surface boundary layer (after Okita-Kitada, 1987)

により確率的に計算する（例えば、佐藤・他, 1995; Iwasaki *et al.*, 1998）。沈着速度 V_d は、空気力学的抵抗（第 4.1.7 項 (2)）のみを考慮する。

$$V_d = \frac{1}{r_a} \quad (2.22)$$

ATM の乾性沈着の計算方法は、 L_r は Table D.4 で設定し、 z_s は前処理 GPV（第 4.1.1 項 (2)）を空間内挿して z' を求める。そして $z' \leq L_r$ にあるトレーサーに対して $[0, 1]$ の一様乱数を付与し、(2.21) 式の確率未満のトレーサーが乾性沈着したとする（Figure 2.7）。

この定式化により乾性沈着するトレーサーの時間変化率は

$$f_z^{\text{ddep}} = -\frac{z'}{\Delta t} \quad (2.23)$$

で与えられる。

2.2.5 湿性沈着過程

湿性沈着過程は、雲底下洗浄（ウォッシュアウト）と雲内洗浄（レインアウト）に分けて計算する。

(1) 雲底下洗浄（ウォッシュアウト）

ウォッシュアウトは、雲がある場合に雲底の高さ L_b の下にあるトレーサーを対象とする。降水の形態（ $\alpha = r$ (雨), s (雪), g (霰)) ごとの沈着確率

$$P_{w(\alpha)} = \begin{cases} 1 - e^{-\Lambda_{w(\alpha)} \Delta t} & (z' < L_b) \\ 0 & (z' \geq L_b) \end{cases} \quad (2.24)$$

により確率的に計算し¹²、トレーサー直下地点へ沈着させる。(2.24) 式で沈着率を表す洗浄係数 $\Lambda_{w(\alpha)}$ は

$$\Lambda_{w(\alpha)} = A_\alpha R_\alpha^{B_\alpha} \quad (2.25)$$

の形で与える（北田, 1994）。ここで R_α [mm/h] は雨、雪、霰それぞれの降水強度であり、 A_α , B_α は各形態の降水粒子によるトレーサーの捕集効率に関する係数である（例えば、Sportisse, 2007）。ただし、その地点の降水強度がしきい値 $R_{\alpha t}$ 以上になった場合は強制的にウォッシュアウトする。

¹²トレーサーの大気中濃度 c の湿性沈着による時間変化 $\partial c / \partial t = -\Lambda_w c$ のラグランジュ表現（ α は省略）。GATM, RATM では以前、 $P_w \approx 1 - (1 - \Lambda_w) \Delta t \approx \Lambda_w \Delta t$ を用いていた。

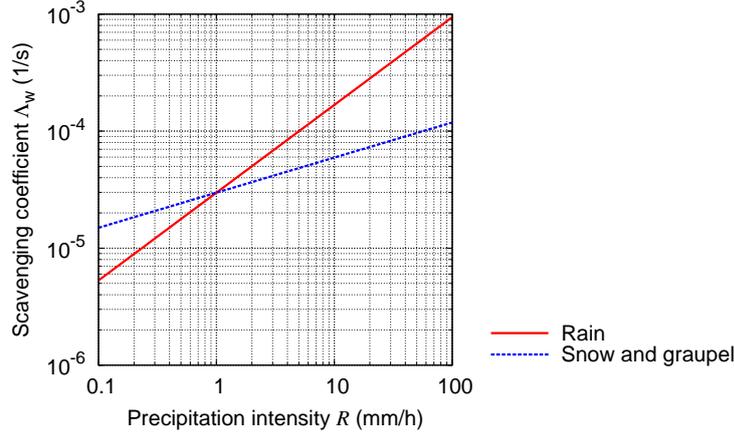


Figure 2.8 Below-cloud scavenging coefficients for rain (red solid line) and snow and graupel (blue dotted line). In this example, $A_r = A_s = A_g = 2.98 \times 10^{-5}$ (1/s), $B_r = 0.75$ and $B_s = B_g = 0.30$ in Equation (2.25). (After Saito *et al.*, 2015a)

ATM のウォッシュアウトの計算方法は、 L_b は第 4.1.8 項 (2)、 R_α は第 4.1.9 項の時間平均した前処理 GPV を使用し、 A_α , B_α 係数および $R_{\alpha t}$ は Table D.13 で設定する。洗浄係数と降水強度の関係を Figure 2.8 に示す。

この定式化によりウォッシュアウトするトレーサーの時間変化率は、(2.23) 式と同様に

$$f_z^{\text{wout}(\alpha)} = -\frac{z'}{\Delta t} \quad (2.26)$$

で与えられる。

(2) 雲内洗浄 (レインアウト)

レインアウトも、雲がある場合に雲頂の高さ L_t と L_b の内にあるトレーサーを対象とする。(2.24) 式と同様に

$$P_r = \begin{cases} 1 - e^{-\Lambda_r \Delta t} & (L_b \leq z' < L_t) \\ 0 & (z' < L_b, L_t \leq z') \end{cases} \quad (2.27)$$

により確率的に計算し、トレーサー直下地点へ沈着させている。洗浄係数 Λ_r は

$$\Lambda_r = S_r \frac{R}{Z} \quad (R \equiv R_r + R_s + R_g, Z \equiv L_t - L_b) \quad (2.28)$$

の形で与える (大喜多, 1987)。ここで R は全降水強度、 Z は雲の厚さ¹³であり、トレーサーの降水中濃度と大気中濃度の比を表す洗浄比 S_r はトレーサーの形態 (沈着性ガス、粒子) に応じて、Hertel *et al.* (1995) により以下のように与える。

沈着性ガスの洗浄比

沈着性ガスの洗浄比は、雲水量を CWC [m^3/m^3]、沈着性ガスのヘンリー定数を H として、次式で与える。

$$S_r = \frac{1}{(1 - CWC)/HR^*T + CWC} \quad (R^* = 8.31 \text{ J/mol.K}) \quad (2.29)$$

粒子の洗浄比

粒子の洗浄比は、トレーサーが雲粒子になる割合を表す活性度を f_{nuc} として、次式で与える。

$$S_r = \frac{f_{\text{nuc}}}{CWC} \quad (2.30)$$

¹³RATM では以前、雲の高さを使用していた。

ATM のレインアウトの計算方法は、 L_t や CWC は T , L_b , R_α などと同様に前処理 GPV (第 4.1.8 項) を使用し、トレーサーの形態の切替および H , f_{nuc} は Table D.13 で設定する。

この定式化によりレインアウトするトレーサーの時間変化率もまた、(2.26) 式と同様に

$$f_z^{rout} = -\frac{z'}{\Delta t} \quad (2.31)$$

で与えられる。

2.2.6 崩壊過程

GATM および RATM に導入されていた崩壊過程は、重力落下や乾性、湿性沈着などにより地表面に付着した分も含む全トレーサーを対象とし、1 タイムステップの間に崩壊してなくなる割合

$$\begin{aligned} P_n &= 1 - \left(\frac{1}{2}\right)^{\Delta t/T_{1/2}} \\ &= 1 - e^{-\Lambda_n \Delta t} \quad \left(\Lambda_n \equiv \frac{\ln 2}{T_{1/2}}\right) \end{aligned} \quad (2.32)$$

により確率的に計算する。ただし $T_{1/2}$ はトレーサーの半減期であり、ATM では Table D.14 で設定する。湿性沈着の沈着確率 (2.24), (2.27) 式と (2.32) 式は同じ関数形である (Figure 2.9)。

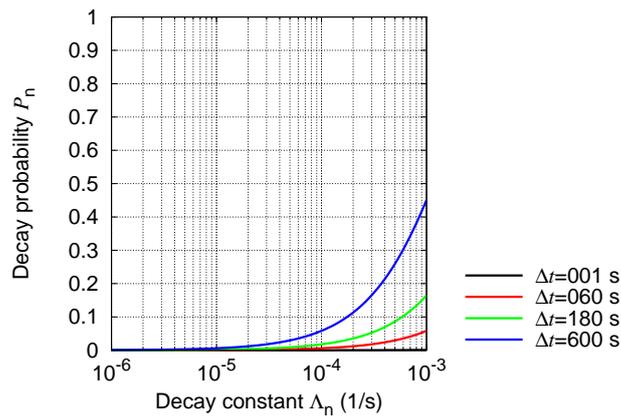


Figure 2.9 Decay probability (Δt is a time step). If a scavenging coefficient is given instead of Λ_n , P_n gives a deposition probability.

崩壊したトレーサーは計算対象から除外されるため、崩壊過程の時間変化率は考えない。

2.3 時間積分

本節では、前節で求めた時間変化率から時間積分する方法と、時間積分した後の処理について述べる。

2.3.1 時間積分法

ATM の時間積分法は、GATM や RATM など多くの移流拡散モデルで使われている前方差分 (オイラー法) とルンゲ・クッタ法を実装している。同じタイムステップで比較したとき、オイラー法は 1 次精度であるが高速なのに対し、ルンゲ・クッタ法は段階 (ステージ) 数は増えるが高精度であるため、予測する対象や予報の性質に応じて選択する。

(1) オイラー法

トレーサーの次のタイムステップの位置を、過程 k における i 成分の時間変化率 f_i^k から

$$\phi_i(t + \Delta t) = \phi_i(t) + \sum_k f_i^k(t, \phi_i(t)) \Delta t \quad (2.33)$$

により時間積分して求める。各成分をあらわに書くと、

$$\lambda(t + \Delta t) = \lambda(t) + \left(f_\lambda^{\text{hadv}} + f_\lambda^{\text{hdif}} \right) \Delta t \quad (2.34a)$$

$$\varphi(t + \Delta t) = \varphi(t) + \left(f_\varphi^{\text{hadv}} + f_\varphi^{\text{hdif}} \right) \Delta t \quad (2.34b)$$

$$z(t + \Delta t) = z(t) + \left(f_z^{\text{vadv}} + f_z^{\text{vdif}} + f_z^{\text{fall}} + f_z^{\text{depp}} + \sum_{\alpha=r,s,g} f_z^{\text{wout}(\alpha)} + f_z^{\text{rout}} \right) \Delta t \quad (2.34c)$$

である。最も基本的な時間積分法であり、(2.4) 式右辺の Δt の 1 次までに対応する。

(2) ルンゲ・クッタ法

一般的な 4 段階の場合、

$$\phi_i(t + \Delta t) = \phi_i(t) + \sum_k \sum_{s=1}^4 b_s d_i^{k(s)} \Delta t \quad (2.35)$$

で時間積分する。ただし補助増分 (s 回目の仮積分値) $d_i^{k(s)}$ は

$$d_i^{k(s)}(t) = f_i^k \left(t + c_s \Delta t, \phi_i(t) + \sum_{s'=1}^4 a_{ss'} d_i^{k(s')} \Delta t \right) \quad (2.36)$$

である。係数の取り方は任意性があるが、古典的なルンゲ・クッタ行列 $a_{ss'}$ 、重み b_s 、節 (ノード) c_s は

$$\begin{aligned} (b_1, b_2, b_3, b_4) &= \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6} \right), \\ (c_1, c_2, c_3, c_4) &= \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1 \right), \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$a_{21} = c_2, a_{32} = c_3, a_{43} = c_4, a_{ss'} = 0 \text{ (その他の場合)}$$

を取る。具体的に (2.37) 式を (2.35), (2.36) 式に代入すると

$$\phi_i(t + \Delta t) = \phi_i(t) + \frac{1}{6} \sum_k \left(d_i^{k(1)} + 2d_i^{k(2)} + 2d_i^{k(3)} + d_i^{k(4)} \right) \Delta t \quad (2.38)$$

ただし

$$d_i^{k(1)}(t) = f_i^k(t, \phi_i(t)) \quad (2.39a)$$

$$d_i^{k(2)}(t) = f_i^k \left(t + \frac{1}{2} \Delta t, \phi_i(t) + \frac{1}{2} d_i^{k(1)} \Delta t \right) \quad (2.39b)$$

$$d_i^{k(3)}(t) = f_i^k \left(t + \frac{1}{2} \Delta t, \phi_i(t) + \frac{1}{2} d_i^{k(2)} \Delta t \right) \quad (2.39c)$$

$$d_i^{k(4)}(t) = f_i^k \left(t + \Delta t, \phi_i(t) + d_i^{k(3)} \Delta t \right) \quad (2.39d)$$

となり、この時間積分法は Δt に関して 4 次精度がある (例えば、宮下, 2002)。この 1 回目の補助増分 $d_i^{k(1)}$ は、オイラー法 (2.33) 式の時間変化率と同じであることに注意する。

ATM の時間積分法の切替は Table D.11 で設定する。ルンゲ・クッタ法を選択した場合、輸送と重力落下過程を短いタイムステップによるルンゲ・クッタ法で時間積分する。時間変化率がタイムステップ依存性をもつ拡散過程と確

率的に計算する乾性、湿性沈着過程は常に長いタイムステップのオイラー法で時間積分する。演算順序は確率計算でトレーサーが ATM の計算対象外になる可能性がある過程を先に行う (付録 B.1)。またルンゲ・クッタ法による輸送、重力落下過程において、短いタイムステップの途中でトレーサーが ATM の計算領域外 (地表面降下も含む) に出た場合、(2.39a) 式のみを用いてオイラー法に切り替えて時間積分する。水平輸送と重力落下過程を結合してオイラー法とルンゲ・クッタ法を比較した結果を Figure 2.10 に示す。終端速度が数 10m/s 程度までのトレーサーを対象とする ATM 計算の場合、ルンゲ・クッタ法ではタイムステップを 180 秒程度に取ってもタイムステップ 1 秒のオイラー法と同じくらいの精度を保つことができる。

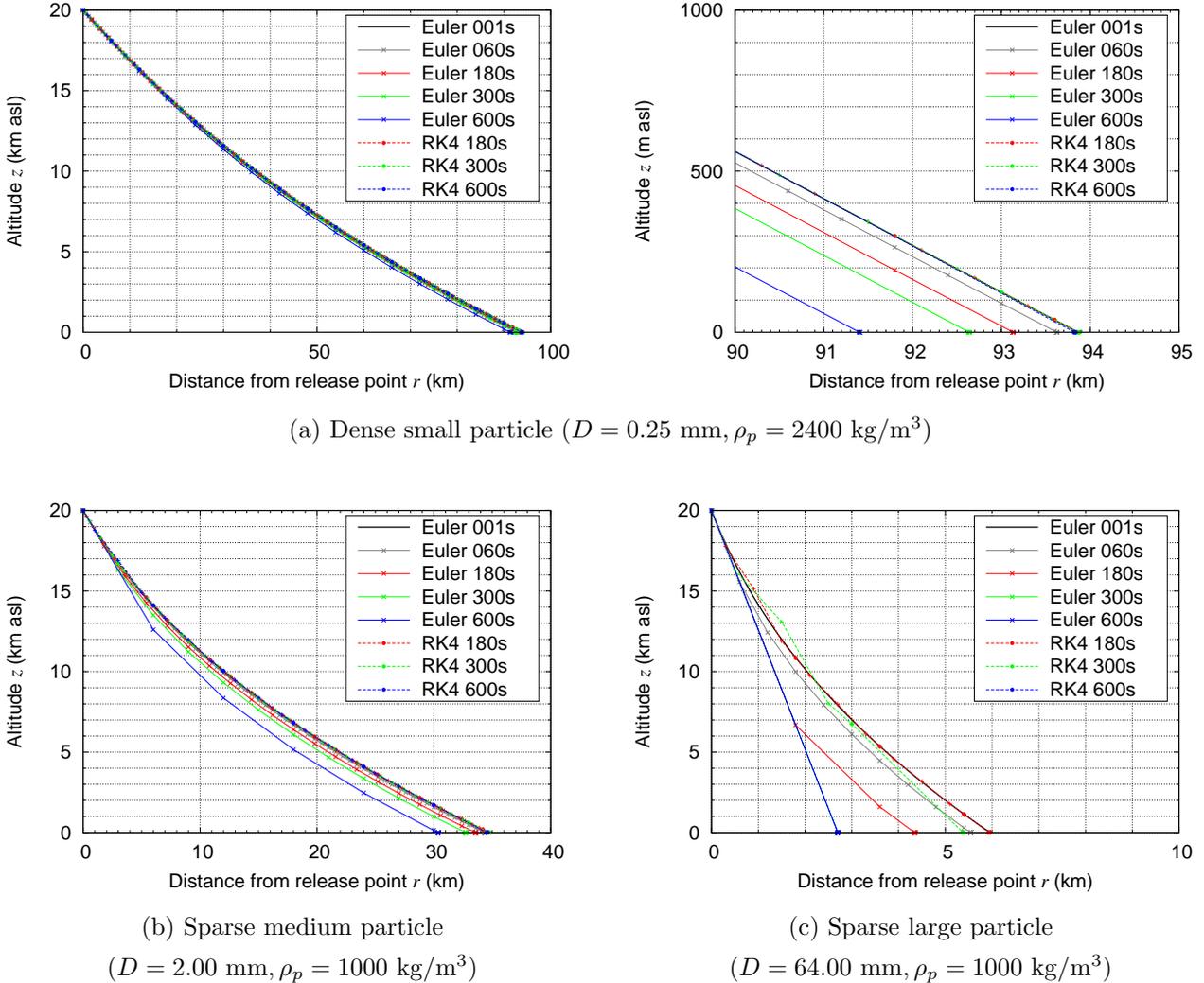


Figure 2.10 Comparison of time integral by Euler or Runge-Kutta (RK4) method with different time step Δt . Euler method with $\Delta t = 1 \text{ s}$ is as a reference. Single tracer trajectory by the ATM calculation with horizontal advection and gravitational fallout processes. Input GPV is given by standard atmosphere (NOAA *et al.*, 1976) combined with zonal wind $U = 10 \text{ m/s}$ uniformly. Single tracer is emitted from the altitude of 20 km asl. Terminal fall velocity of the tracer is according to Suzuki's law with fixed diameter D , density ρ_p and form factor $F = 1/3$ (Figure 2.6). The symbol \times or \bullet denote tracer point at each time step by Euler or RK4 method and $+$ denotes intermediate point of the temporal integral by RK4 method in Equation (2.38), i.e. horizontal distance from release point $r(t) + \sum_k d_r^{k(1)} \Delta t/6, r(t) + \sum_k (d_r^{k(1)} + 2d_r^{k(2)}) \Delta t/6, r(t) + \sum_k (d_r^{k(1)} + 2d_r^{k(2)} + 2d_r^{k(3)}) \Delta t/6$, where $k = \{\text{hadv, fall}\}$. Right figure of (a) shows enlarged near ground of the left one.

2.3.2 積分後処理

1 タイムステップの時間積分が終わった後、鉛直輸送・拡散または重力落下により、トレーサーの高度がモデル標高より低くなった場合は、Figure 2.11 に示すように、地表面へ降下または大気中へ反射のいずれかの調節を行う。

(1) 地表面降下に伴う引戻し

地表面へ降下させる場合は、1 タイムステップ Δt の間に進み過ぎたトレーサーの位置 (λ, φ, z) を地表面まで引き戻す調節を行う。時間積分前後のトレーサーの地表面からの高さ（深さ）をそれぞれ $z'(t), z''(t+\Delta t) \equiv -z'(t+\Delta t) > 0$ とし、この間のモデル標高は平坦と仮定して、

$$\lambda(t+\Delta t) \rightarrow \lambda(t+\Delta t) - \frac{z''(t+\Delta t)}{\Delta z} \Delta \lambda \quad (\Delta \lambda \equiv \lambda(t+\Delta t) - \lambda(t)) \quad (2.40a)$$

$$\varphi(t+\Delta t) \rightarrow \varphi(t+\Delta t) - \frac{z''(t+\Delta t)}{\Delta z} \Delta \varphi \quad (\Delta \varphi \equiv \varphi(t+\Delta t) - \varphi(t)) \quad (2.40b)$$

$$z(t+\Delta t) \rightarrow z_s \quad (\Delta z \equiv z'(t) + z''(t+\Delta t)) \quad (2.40c)$$

だけ引き戻して、計算を終了する。

(2) 地表面反射に伴う跳返り

地表面で反射させる場合は、RATM と同様に鏡面反射 (Iwasaki *et al.*, 1998) により、トレーサーを地表面で跳ね返らせる調節を行う。時間積分後のトレーサーの反射点の高度は

$$z(t+\Delta t) \rightarrow z(t+\Delta t) + 2z''(t+\Delta t) \quad (2.41)$$

として、計算を継続する。

ATM の地表面における降下または反射の調節は Table D.11 で設定する。

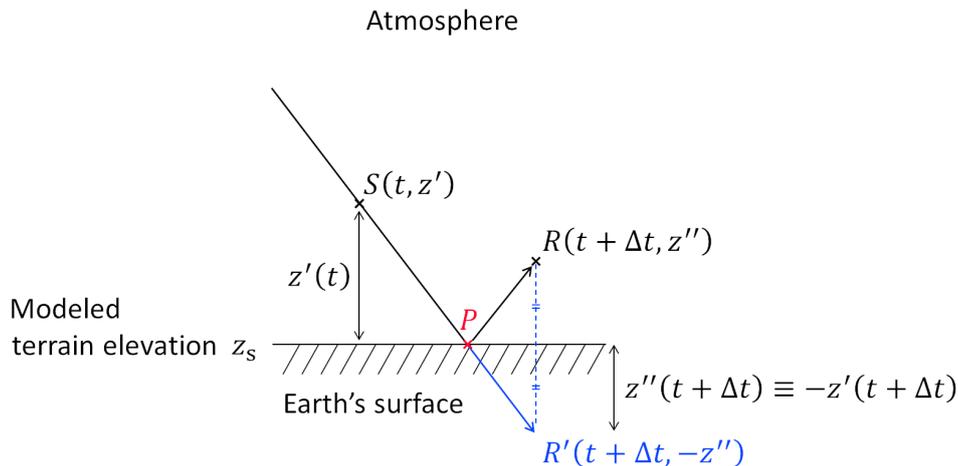


Figure 2.11 Fallout or reflection of tracer on a surface. $S(t, z')$, $R'(t+\Delta t, -z'')$ are the tracer points before/after time integration, $R(t+\Delta t, z'')$ is the mirror symmetric point of R' and $P(t+\Delta t, 0)$ is the pullback point on the surface.

2.4 空間内挿

本節では、ATM に入力する前処理 GPV をトレーサーの位置へ内挿する方法と、ATM 計算したトレーサーの物理量を出力格子へ内挿する方法、すなわち粒子・格子変換について述べる。

2.4.1 入力値の空間内挿法

第 2.2 節で述べた各過程の時間変化率を求めるには、第 4 章で述べる入力値の前処理 GPV をトレーサーの位置に内挿する必要がある。時間変化率を求める前後二時刻の GPV について時間内挿と空間内挿を行うが、前処理 GPV の格子点の位置は時間変化する場合がありますので（第 4.1.1 項 (2)）、先に前時刻と後時刻において、それぞれの予報時刻の GPV をトレーサーの位置に空間内挿する。その後、時間変化率を求める時刻への時間内挿を線形内挿¹⁴で行う。

空間内挿は、一般に数値予報 GPV の鉛直層厚に対する水平格子間隔の縦横比が大きいため、特に鉛直方向の内挿値の空間連続性を保つために、水平方向と鉛直方向を分けて内挿している。そこでまず、Figure 2.12 に示すように、トレーサーを囲む 8 格子点のうち、下面 4 点と上面 4 点の GPV（例えば、 $U_{k_{ij}}$ ）をトレーサーの水平位置に逆距離

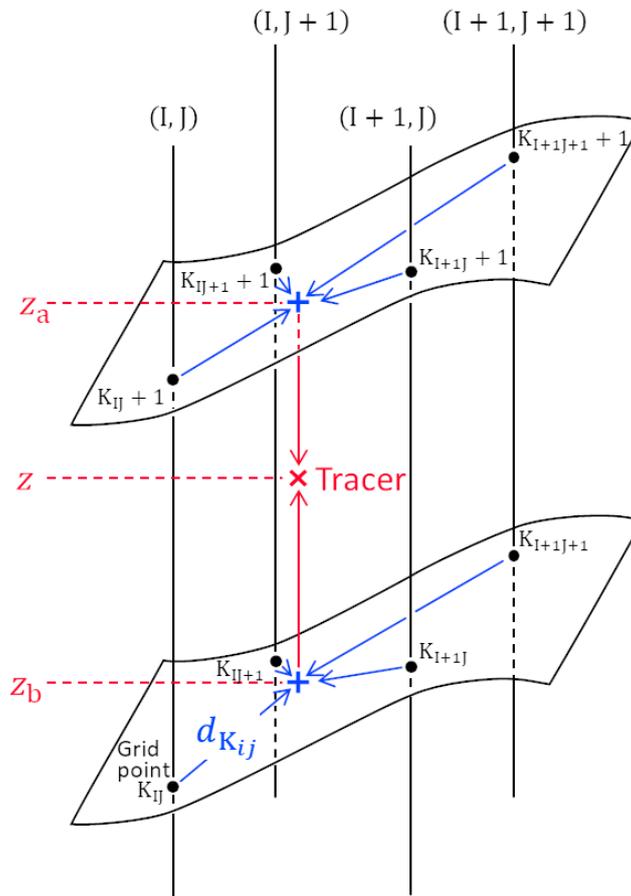


Figure 2.12 Space interpolation (GPV input). The symbol \times denotes tracer position, \bullet denote grid points surrounding the tracer, (I, J) , $(I, J+1)$, $(I+1, J)$, $(I+1, J+1)$ are horizontal grid numbers and K_{ij}, K_{ij+1} , $(i = I, I + 1, j = J, J + 1)$ are vertical plane numbers of their points. z is tracer altitude, z_a and z_b are interpolation altitude above and below the tracer (the symbol $+$), respectively.

¹⁴(2.43) 式と同形で、 $z \rightarrow t$ (時間変化率を求めるトレーサーの時刻)、 $z_b, z_a \rightarrow t_b, t_a$ (t の前後の GPV の予報時刻)、 $\Delta Z \rightarrow t_a - t_b \equiv \Delta T_{\text{GPV}}$ (付録 B.2) と置換した式による内挿。

加重法

$$U_b = \frac{\sum_{i=I}^{I+1} \sum_{j=J}^{J+1} d_{K_{ij}}^{-p} U_{K_{ij}}}{\sum_{i=I}^{I+1} \sum_{j=J}^{J+1} d_{K_{ij}}^{-p}} \quad (2.42a)$$

$$U_a = \frac{\sum_{i=I}^{I+1} \sum_{j=J}^{J+1} d_{K_{ij+1}}^{-p} U_{K_{ij+1}}}{\sum_{i=I}^{I+1} \sum_{j=J}^{J+1} d_{K_{ij+1}}^{-p}} \quad (2.42b)$$

により 2 次元内挿する¹⁵。ここで $d_{k_{ij}}$ ($k_{ij} = K_{ij}, K_{ij} + 1$) は各格子点からトレーサーの水平位置までの距離であり、重み付ける指数は ATM では $p = 1$ を取っている¹⁶。また下面については、その格子点直下のモデル標高がトレーサーの高度 z より高い場合は内挿対象から除外する¹⁷。次いで、GPV の高度も同様に (2.42a), (2.42b) 式で内挿して下面・上面の高度 z_b, z_a を求め、トレーサーの高度へ線形内挿する：

$$u = \frac{z_a - z}{\Delta Z} U_b + \frac{z - z_b}{\Delta Z} U_a \quad (\Delta Z \equiv z_a - z_b) \quad (2.43)$$

2.4.2 出力値の空間内挿法

ATM はラグランジュモデルであるため、その計算結果を格子出力する場合は各トレーサーの物理量を粒子・格子変換する必要がある。これは、不規則に配置された多数のトレーサーから定点である格子点への内挿と見ることができ、ATM では以下に述べる方法で個々のトレーサーの物理量を格子点へ分配する。

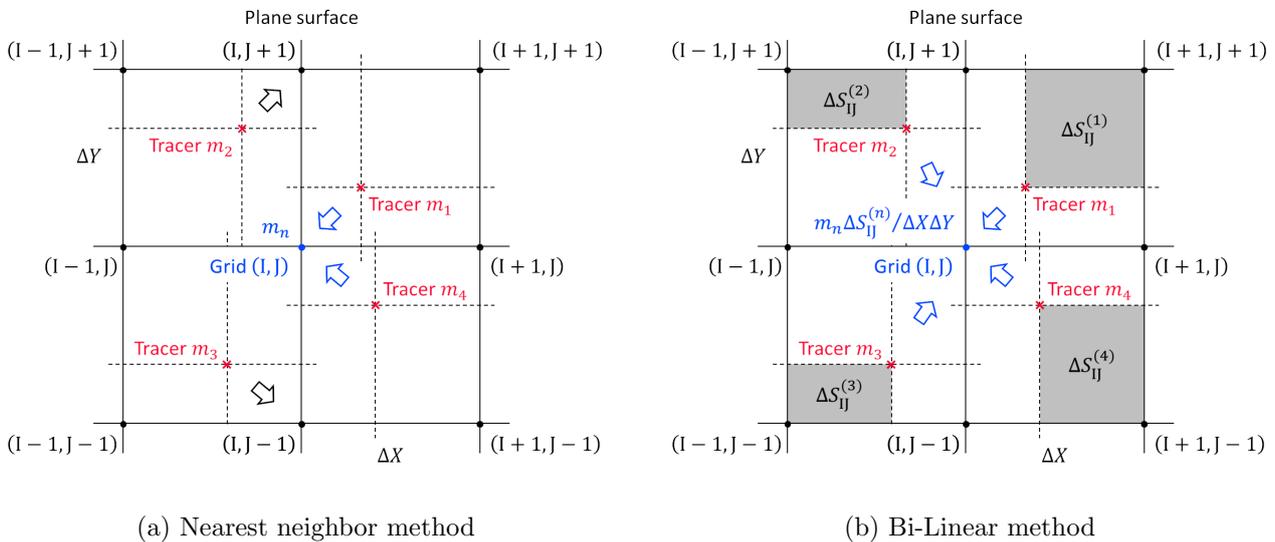


Figure 2.13 Space interpolation (ATM output). The symbol \times denote tracer positions, \bullet denote surface grid points including the tracers and (I, J) and $(I \pm 1, J \pm 1)$ are horizontal grid numbers. m_n is physical quantity of the tracer (number n), $\Delta S_{IJ}^{(n)}$ is partial grid area divided by the n -th tracer and $\Delta X, \Delta Y$ are horizontal grid spacing.

¹⁵ゼロ割回避として、 $d_{k_{ij}}$ が Table C.2 で設定するパラメータ `space_epsilon` より小さい場合は、トレーサー近傍の GPV のみ使用する（最近接内挿）。

¹⁶Table C.2 にあるパラメータ `idw` で固定している。

¹⁷4 格子点すべてのモデル標高がトレーサーの高度より高い場合は、トレーサーが地表面に付着したとして ATM の計算対象から除外されている。

(1) 最近接内挿

最近接内挿に相当する分配方法の場合、Figure 2.13 (a) に示すように、出力格子点 (I, J) の隣接 4 格子内に入ったトレーサーについて、各格子内の最近接格子点のみにトレーサーの物理量（例えば、 m_n ）を配分して、格子点出力値

$$M_{IJ} = \sum'_n m_n \tag{2.44}$$

を求める。ただし \sum' は (I, J) に最近接するトレーサーについてのみ和を取る。

(2) 共一次内挿

共一次内挿に相当する分配方法の場合、Figure 2.13 (b) に示すように、出力格子点の隣接 4 格子内に入ったトレーサーの物理量を面積比を重みとして分配して、

$$M_{IJ} = \sum_n \frac{\Delta S_{IJ}^{(n)}}{\Delta X \Delta Y} m_n \tag{2.45}$$

で求める。ここで、 $\Delta S_{IJ}^{(n)}$ は n 番目のトレーサーが (I, J) を頂点にもつ格子を分割する面積、 $\Delta X, \Delta Y$ は出力格子の水平格子間隔である。

ATM の格子出力の方法は Table D.15 で切り替える。3次元出力（例えば、濃度）の場合も、予め Table D.16 で指定した層厚に入ったトレーサーについて、その物理量を上述の方法で 2次元内挿して出力する。また、トレーサーのもつ物性（例えば、粒径）の最大値・最小値を出力する場合は、最近接内挿で出力する。

2.5 出力

ATM の計算結果は、粒子と格子で出力する。格子出力は粒子出力が元データになるが、ATM の出力時間間隔は通常、タイムステップより長く取るので、後処理では算出できない時間平均値などがあるため格子出力もしている。

ATM の出力時間間隔は Table D.15 で設定する。

2.5.1 粒子出力

粒子出力は、トレーサーの基本情報と放出源の基本情報をヘッダ出力した後、ATM 計算によるトレーサーの時間発展した状態を瞬時値としてバイナリ出力する。

ATM の計算可能時間・領域は、入力する GPV の有効な時間・領域と同じである。計算可能な時間・領域を超えたトレーサーは停止するが、粒子出力にはそのことを示すフラグとともに常時、全トレーサーの状態を出力する。

粒子出力の内容については、付録 F.1.2 を参照されたい。

2.5.2 格子出力

格子出力は、第 2.4.2 項の方法でトレーサー算出した格子点上の物理量を NuSDaS¹⁸出力する。出力格子の座標は NuSDaS 定義ファイル¹⁹および層厚は Table D.15 で設定する。また、出力値の瞬時値、平均値、積算値の切替は Table D.15 で指定する。

格子出力の要素については、付録 F.2.1 を参照されたい。

¹⁸NuSDaS については例えば、原 (2017a) およびマニュアル (豊田・他, 2019) を参照されたい。

¹⁹付録 A の `Atm/Const/Atm/Nusdef` に格納されている。