

気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる
予測計算の開発に関するフイージビリティスタディ
報 告 書

平成20年3月

財団法人 機械システム振興協会
委託先 財団法人 航空機国際共同開発促進基金



この事業は、競輪の補助金を受けて実施したものです。

<http://ringring-keirin.jp/>



目 次

序

はじめに

1	スタディの目的	1	
2	スタディの実施体制	3	
3	スタディの内容	6	
第1章 化学輸送モデルの試作			8
1.1	モデルの仕様	8	
1.2	作業内容	36	
1.3	気象データの収集・整理	45	
1.4	モデルの検証	55	
1.5	海外調査の成果	102	
第2章 境界値データベースの作成			104
2.1	データ仕様	104	
2.2	収集したデータ	106	
4	スタディの成果	110	
5	スタディの今後の課題および展開	114	
[資料編]			
参考資料—1	参考文献	115	
参考資料—2	用語集	116	
参考資料—3	利用マニュアル	120	
参考資料—4	設計書	130	

序

わが国経済の安定成長への推進にあたり、機械情報産業をめぐる経済的、社会的諸条件は急速な変化を見せており、社会生活における環境、都市、防災、住宅、福祉、教育等、直面する問題の解決を図るためには技術開発力の強化に加えて、多様化、高度化する社会的ニーズに適応する機械情報システムの研究開発が必要であります。

このような社会情勢の変化に対応するため、財団法人機械システム振興協会では、財団法人日本自転車振興会から機械工業振興資金の交付を受けて、システム技術開発調査研究事業、システム開発事業、新機械システム普及促進事業を実施しております。

このうち、システム技術開発調査研究事業及びシステム開発事業については、当協会に総合システム調査開発委員会(委員長：東京大学名誉教授 藤正 巖氏)を設置し、同委員会のご指導のもとに推進しております。

本「気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる予測計算の開発に関するフィージビリティスタディ」は、上記事業の一環として、当協会が財団法人航空機国際共同開発促進基金に委託し、実施した成果をまとめたもので、関係諸分野の皆様方のお役に立てれば幸いです。

平成20年3月

財団法人 機械システム振興協会

はじめに

財団法人航空機国際共同開発促進基金は、平成19年度研究開発の一つとして、財団法人日本自転車振興会の機械工業振興資金の交付を受けた、財団法人機械システム振興協会からの受託事業「気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる予測計算の開発に関するフィージビリティスタディ」を実施した。本報告書は、その研究開発報告書である。

人間の社会経済活動に伴う大気組成の変動が気候に影響を与える、いわゆる地球温暖化の問題に対して、京都議定書が発効し、世界規模で地球温暖化防止に取り組む枠組みが作られ、その活動が本格化している。

地球温暖化の問題とは、大気中の微量化学成分のうち、二酸化炭素(CO₂)、水蒸気(H₂O)、メタン(CH₄)、亜酸化窒素(N₂O)、オゾン(O₃)等のいわゆる温室効果気体が地表および大気からの赤外線放射を吸収するため、その増加に伴って地表付近の気温が上昇することである。

大型精密機器システムにはこのような問題が内在し、特に、その代表である航空機のエンジン排気には、二酸化炭素、水蒸気が含まれているので、これらは地球温暖化に影響する。また、エンジン排気に含まれる窒素酸化物(NO_x)は、亜音速機が飛行する高度10km程度の対流圏では、大気中の光化学反応によって温室効果気体であるオゾンを生成し、温暖化を促進させる。

一方、次世代の超高速輸送機と期待される超音速航空機は、高空を飛行する際、エンジン排気を直接成層圏(高度20kmほどの高高度)に排出するため、その中の窒素酸化物がオゾン層に著しい影響を与えることが指摘されている。このときの最大の問題点は、成層圏における窒素酸化物はオゾンを減少させ、太陽からの有害な紫外光に対する防衛が弱まり、人体に悪影響を与えることである。

このため本スタディでは、これまでの次世代航空機等開発調査(超音速輸送機開発調査)に係わる環境影響調査、「大型精密機器システムが地球温暖化に及ぼす影響予測の化学輸送モデル開発に関する調査研究」及び「気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる予測計算の高精度・高次元化に関する調査研究」において実施してきた技術をベースに、特に機械システムと深い関係を有する航空機産業が、地球温暖化問題に適確に対応することにより、航空機の国際共同開発の促進に寄与するとともに、機械システムの振興に寄与することを目的とし、「気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる予測計算の開発に関するフィージビリティスタディ」を実施した。

実施に際しては、当基金内に「化学輸送モデル開発調査委員会」を設け、その委員会において開発方針・内容等を確認しつつ、研究開発を実施した。

この研究開発にあたっては、事業の実現と推進にご尽力を賜った経済産業省および財団法人日本自転車振興会ならびに財団法人機械システム振興協会の関係者各位に厚く御礼申し上げます。

平成20年3月

財団法人 航空機国際共同開発促進基金
会 長 佐々木 元

1. スタディの目的

人間の社会経済活動に伴う大気組成の変動が気候に影響を与える、いわゆる地球温暖化の問題に対して、世界的な取り組みが本格化している。地球温暖化の問題とは、大気中の微量化学成分のうち、二酸化炭素（CO₂）、水蒸気（H₂O）、メタン（CH₄）、亜酸化窒素（N₂O）、オゾン（O₃）等のいわゆる温室効果気体が地表及び大気からの赤外線放射を吸収するため、その増加に伴って地表付近の気温が上昇することである。近年、この問題の重要性が指摘され、社会的な関心が高まっている。

機械システムの一つである航空機のエンジン排気には二酸化炭素が含まれており、地球温暖化に影響する。また、エンジン排気に含まれる窒素酸化物（NO_x）は、亜音速機が飛行する高度10km程度対流圏では、大気中の光化学反応によって温室効果気体であるオゾンを生成し、温暖化を促進させる。

航空機のエンジン排気が環境に与える影響は小さくない。空港周辺の大気質への影響を抑えるための排出ガスの規制は、1998年に開催された国際民間航空機構（ICAO）の第4回航空機環境保全委員会（CAEP4）で排出基準が16%強化された後、2004年の第6回航空機環境保全委員会（CAEP6）においてもさらに規制が強化された。

また、巡航時の排出ガスについても、大気微量成分や雲の生成を通じて気候変動に影響を与えることが懸念されることから、規制を設けることがCAEPで検討されている。

一方、次世代の超高速輸送機と期待される超音速航空機は、高空を飛行する際、エンジン排気を直接成層圏（高度20kmほどの高い高度）に排出するため、その中の窒素酸化物がオゾン層に著しい影響を与えることが指摘されている。このときの最大の問題点は、成層圏における窒素酸化物はオゾンを減少させ、太陽からの有害な紫外光に対する防禦が弱まり、人体に悪影響を与えることである。

このような状況下にあって、エンジン排気が環境に与える影響を正確に予測することが必須である。現在では、民間航空機の開発・生産は国際共同事業が趨勢であり、今後我が国が国際共同事業において主体的立場を確保し、戦略的産業である航空機産業の振興、ひいては機械システムの振興に資するには、航空機の技術開発とともに、航空機が地球温暖化に及ぼす影響を予測するための世界と対等以上の技術を保有することが必要である。その一つは、上記問題に対処し得る化学輸送モデルの完成である。

地球温暖化の程度を評価するためには、気候モデル（いわゆる気象予報の数値計算モデル）が用いられる。気候モデルでは、これら温室効果気体の濃度は既知なものとして外部から与えるのが普通である。しかし、現実の大気中では、オゾンやメタンなどは光化学反応によって生成・消滅し、その反応速度は気温によって変わるため、温暖化が進んだ状態ではその時の気温によって反応速度を計算し、生成気体成分の濃度を計算する必要がある。

また、これらの温室効果気体の多くは反応時定数が長いため、気候が変わるとそれによって濃度分布が変わる可能性もある。これらの効果も含めて温暖化予測を行うためには、大気中の光化学反応と風による物質輸送を模擬し、各成分ごとの連続の式を解く化学輸送モデルを用いて、気候モデルと結合させた計算を行うことが不可欠である。

化学輸送モデルについては、我が国が独自で開発した2次元化学輸送モデル（成層圏オゾンの緯度・高度分布を予測するモデル）や、公開されているマックス・プランク気象研究所のMOZART等があるが、成層圏・対流圏の両方を対象とする3次元化学輸送モデルは、世界的にみて未だ研究段階で、実用化にいたっていない。

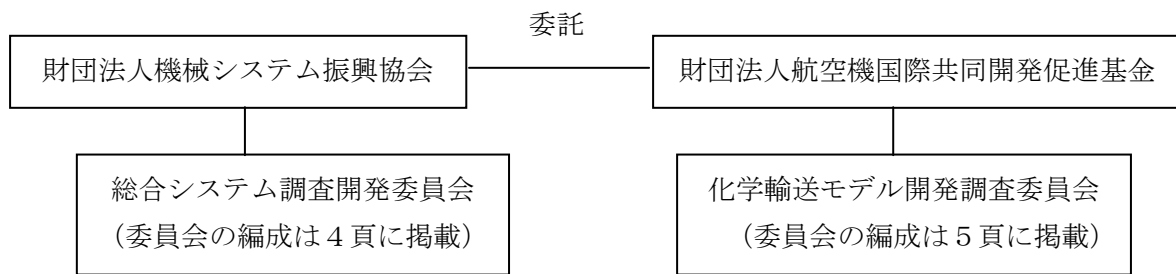
以上のような背景に基づき、本スタディの目的と効果を次のように設定する。

- (1) 対流圏及び成層圏における亜音速航空機と超音速航空機（超高速機）による温室効果気体の影響を調査し得る化学輸送モデルの開発調査を行う。すなわち、航空機エンジン排気による対流圏オゾンの増加は、二酸化炭素の増加とは違って、地球上の場所と時間で著しく異なる（航空機が頻繁に飛ぶ高度と経路でオゾンの増加が大きい）ので、成層圏における窒素酸化物とオゾンの反応によるオゾンの減少も含めて、それらを正確に把握できる化学輸送モデルを開発し、オゾン変化量の全地球的分布を計算することが必要である。
- (2) 化学輸送モデルの開発調査は、亜音速機の開発に対して次の効果を有する。
 - ・当該モデルにより、航空機が排出する各種物質の環境への具体的影響度を明らかにすることにより、今後、航空機エンジン排気、及び航空機運用方法に対する環境基準の設定・改訂にあたって、主導的な役割を果たすことができること。
 - ・現在行われている「環境適応型小型航空機用エンジン開発」を始め、今後開発されるエンジン並びに航空機の設計に際して、環境影響度の事前検証に当該モデルによる解析が有効に活用されること。
- (3) 将来、超音速航空機（超高速機）の国際共同開発にあたっては、亜音速機とは異なった高度、運用形態で飛行するため、さらなる評価、環境基準制定が必要となり、本「化学輸送モデル開発調査」の成果を有効に活用した影響評価が必須である。
- (4) 化学輸送モデル開発調査では、窒素酸化物等の温室効果気体を含む数10種類の物質の濃度を精度良く計算できる数値モデルを検討するので、航空機のみならず、機械全般が排出する物質の影響をも予測可能であり、機械システムの性能向上にも寄与し得る。

以上のことから、本スタディにおける成果は、航空機の国際共同開発において、国際的に先導的な日本の能力を与え得るものとなる。

2. スタディの実施体制

財団法人機械システム振興協会に「総合システム調査開発委員会」を、財団法人航空機国際共同開発促進基金に「化学輸送モデル開発調査委員会」を設置し、その委員会において研究開発方針・内容等を確認しつつ、スタディを実施した。



総合システム調査開発委員会委員名簿

(順不同・敬称略)

委員長	東京大学 名誉教授	藤 正 巖
委 員	埼玉大学 総合研究機構 地域共同研究センター 教授	太 田 公 廣
委 員	独立行政法人産業技術総合研究所 エレクトロニクス研究部門 副研究部門長	金 丸 正 剛
委 員	独立行政法人産業技術総合研究所 産学官連携推進部門 産学官連携コーディネータ	志 村 洋 文
委 員	東北大学大学院 工学研究科 教授 (未来科学技術共同研究センター長)	中 島 一 郎
委 員	東京工業大学大学院 総合理工学研究科 教授	廣 田 薫
委 員	東京大学大学院 工学系研究科 准教授	藤 岡 健 彦
委 員	東京大学大学院 新領域創成科学研究科 教授 (副研究科長)	大 和 裕 幸

「化学輸送モデル開発調査委員会」

平成19年度委員名簿

No.	区分	氏名(敬称略)	所属・役職
1	委員長	久保田 弘敏	帝京大学 理工学部 航空宇宙工学科 教授 (東京大学名誉教授)
2	委員	小川 利紘	独立行政法人 宇宙航空研究開発機構 主幹研究員 (東京大学名誉教授)
3		田丸 卓	独立行政法人 宇宙航空研究開発機構 主任研究員
4		林 茂	独立行政法人 宇宙航空研究開発機構 航空プログラムグループ 環境適応エンジンチーム長
5		津江 光洋	東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻 教授
6		加茂 圭介	富士重工業(株) 航空宇宙カンパニー 企画管理部 主管
7		高見 光	三菱重工業(株) 名古屋航空宇宙システム製作所 民間機技術部 基礎設計課 主席
8		葉山 賢司	川崎重工業(株) 航空宇宙カンパニー 技術本部 研究部 空力技術課 上級専門職
9		廣光 永兆	石川島播磨重工業(株) 航空宇宙事業本部 技術開発センター 要素技術部 燃焼グループ 主査
10		杉浦 重泰	航空技術&ビジネス・コンサルタント
11		末永 民樹	(株) JAL エアロ・コンサルティング 主席コンサルタント
12	吉田 修	(株) 日本航空インターナショナル地球環境部 部長	
13	オブザーバー	畑田 浩之	経済産業省 製造産業局 航空機武器宇宙産業課 課長補佐
14		柳田 晃	(社) 日本航空宇宙工業会 技術部部長
15		津田 直士	(財) 日本航空機開発協会 第二企画室 超高速機グループリーダー
16	事務局	高岡 武司	(財) 航空機国際共同開発促進基金 常務理事
17		松崎 博樹	(財) 航空機国際共同開発促進基金 企画調査部長
18		中西 俊仁	(財) 航空機国際共同開発促進基金 企画調査部 部長代理
19		松園 正	(財) 航空機国際共同開発促進基金 企画調査部 部付
20		榊原 篤志	(財) 航空機国際共同開発促進基金 企画調査部 部付

3. スタディの内容

平成17年度までの調査研究において、航空機エンジン排気による地球温暖化への影響予測のために、オゾン等の温室効果気体への変動を予測する3次元化学輸送モデルが満たすべき仕様が、その一連の手順を含めて明確になり、実際のモデル開発が可能となった。

一方、航空機排出物の環境影響を予測するために、既存の3次元化学輸送モデルでは、高度領域や対象化学種、あるいはモデル内で扱うプロセスの点で、不十分であることが明らかになった。

化学輸送モデルでは、約50種類の化学種の濃度を計算するため、太陽放射による光解離や、気体成分どうしの気相反応、エアロソルと呼ばれる固体もしくは液体の微粒子の表面で起きる異相反応等、全部で100種類以上の反応を扱うことになる。

このような複雑な数値モデルの開発を一度に開発することは大きなリスクを伴う。このリスクを軽減するため、風による物質の移動を模擬する物質輸送モデルの部分と、太陽放射による光解離や化学反応（全部で100種類以上の反応を扱うことになる）を模擬する化学反応モデルの部分のそれぞれを試作し、問題がないか確認しながら、段階的に開発を進めることが必要である。

平成18年度は、3次元化学輸送モデルの物質輸送モデルのプロトタイプを試作するとともに、境界条件選択機能の試作を行ったが、今年度は、平成18年度のプロトタイプを基に化学輸送モデルを試作し、また、境界値データベースの作成を実施する。

3-1. 化学輸送モデルの試作

平成18年度に開発した3次元物質輸送モデルに化学反応を組み込み、3次元化学輸送モデルの試作品を海外の最新情報を取り込みつつ作成する。この3次元化学輸送モデルは、化学種の連続の式（化学反応による生成・消滅項を含む）を数値的に時間積分し、対象化学種の数密度の緯度・経度・高度の3次元分布を求めるものである。

対象領域は、3次元物質輸送モデルと同様、

緯度：北極～南極

経度：西経180°～東経180°

高度：地表～10hPa面（約30km）

とし、水平（緯度・経度）解像度は2.5°、鉛直解像度は約2kmとする。

数値解法には、気象モデルの座標格子系になるべく依存しないことと、並列計算機への適用における困難が少ないことを考慮し、セミラグランジュ法の一つであるキュービック・ラグランジュ (CUL) 法を用いる。入力するデータとしては、気象データ (気温、3次元風速) のほか、初期条件 (対象化学種の3次元分布) および境界条件 (地表、大気上端) を読み込めるようにする。

化学種の種類は80種程度を想定し、化学反応には気相反応のほか、光解離や異相反応など全部で250種類程度の中から絞り込んで決定する。また、極域成層圏雲 (PSC : Polar Stratospheric Cloud) 表面で起きる異相反応の反応速度を計算するため、PSCの表面積密度を気温・硝酸濃度等から計算するアルゴリズムをモデル内に組み込む。

作成したモデルを用いて、オゾン等の化学種の濃度分布について計算を実施し、計算が発散したり、数値拡散を起こしたり、不自然な分布になったりしないかどうか確認する。また、実用的な速度で計算できるかどうかを検証する。さらに、計算結果をNASAの「モデルと観測ワークショップⅡ」の報告書等にまとめられている観測値や他のモデルの計算値と比較し、どの程度一致するかを検証する。

3-2. 境界値データベースの作成

3次元化学輸送モデルによる化学物質濃度の予測を行う場合、境界条件を設定しなければならない。本スタディで試作する全球モデルでは、経度方向は周期境界条件 (東経180°と西経180°は連続)、緯度方向にはフラックスが0 (90°を超える緯度は存在しない) とすればよいが、地表および大気上端における境界条件については、化学種ごとにどのような境界条件が適しているかを検討し設定する必要がある。

本スタディでは、この3次元化学輸送モデルの境界条件となる化学種ごとの境界値のデータを収集しデータベース化する。大気上端の境界については観測値が少ないので、単一の値や緯度分布を与えることになるが、地表側の境界については海陸分布や緯度経度分布を考慮した濃度分布を入力できるようにしておく。また、境界値が季節変化をしたり時間とともに増大したりするケースも考えられるため、このような条件にも対応できるようにしておく。

前項で試作した3次元化学輸送モデルに上記の境界条件を与えて試計算を行い、機能が正常に実装されているか確認する。

第1章 化学輸送モデルの試作

平成18年度に開発した3次元物質輸送モデルに化学反応を組み込み、3次元化学輸送モデルの試作品を作成する。作成したモデルを用いて、オゾン等の化学種の濃度分布について計算を実施し、計算が発散したり、数値拡散を起こしたり、不自然な分布になったりしないかどうか確認する。また、実用的な速度で計算できるかどうかを検証する。さらに、計算結果をNASAの「モデルと観測ワークショップⅡ」の報告書¹⁾等にまとめられている観測値や他のモデルの計算値と比較し、どの程度一致するかを検証する。

1.1 モデルの仕様

今年度開発する3次元化学輸送モデルのプロトタイプ仕様を以下に示す(3次元化学輸送モデル開発計画全体については表1.1-1参照)。

(1) プログラムの仕様

3次元化学輸送モデルは、大気中の光化学反応及び輸送過程を模擬した計算を行うことで、微量成分の濃度(体積混合比または数密度)を緯度・経度・気圧(高度に相当)の3次元的な分布として算出する計算機プログラムである。

① 基本方程式

全球大気中の微量成分の濃度を計算するため、化学種の反応を考慮した物質の「連続の式」(球面座標系)を用いる。鉛直座標については対数気圧座標系とし、鉛直風速も気圧単位で表示されたものを用いる。

$$\frac{df_i}{dt} + \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} (f_i u) + \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} (f_i v \cos \varphi) + e^\zeta \frac{\partial}{\partial \zeta} (f_i w e^{-\zeta}) = \frac{P_i}{n_0} - L_i f_i \quad (1.1-1)$$

(λ, φ, ζ): 経度・緯度・対数気圧 ($\zeta = H \log_{10}(p_0/p)$, $p_0 = 1000 \text{hPa}$, $H = 16 \text{km}$)

(u, v, w): 風速 ($w = \frac{d\zeta}{dt} = -\frac{H}{\log_{10} p} \omega$ 。ここで ω は気圧座標における鉛直風速で $\omega = \frac{dp}{dt}$)

a : 地球の半径

f_i : 化学種 i の体積混合比 [未知変数]

P_i : 光解離を含む諸反応による化学種 i の生成率

L_i : 諸反応による化学種 i の消滅係数

n_0 : 大気分子の数密度

② 取り扱う化学種

表 1.1-2 に掲げる化学種を計算対象とする。なお、実際の計算にあたっては、実行時に計算する化学種を選択できるようにする。また、 O_x 、 NO_x 、 HO_x 、 ClO_x 、 BrO_x はファミリーとしてまとめて計算し、各時刻ごとに光化学平衡条件による分配を行う。

[酸素系]	$O_x = O_3 + O + O(^1D)$
[窒素系]	$NO_x = NO + NO_2$
[水素系]	$HO_x = OH + HO_2 + H$
[塩素系]	$ClO_x = Cl + ClO$
[臭素系]	$BrO_x = Br + BrO$

安定な化学種である N_2 、 O_2 は、データとして与えるだけで計算は行わない。また、 H_2O については気象データ中の相対湿度から求める。

③ 気象データ

以下のような全球気象解析データを入力できるようにする。

- 水平解像度：2.5° 格子
- 鉛直解像度：15 層 (1000, 925, 850, 700, 500, 400, 300, 250, 200, 150, 100, 70, 50, 30, 10hPa)
- 時間間隔：30 分程度 (但し、時間間隔の長いデータを補間して用いてもよい)
- 気象要素：気温 T ，水平風速(u, v)，鉛直風速 ω ，相対湿度 RH (10hPa 面まで)

上記の仕様を満たす気象データとして、本スタディでは ECMWF の全球気象解析データを使用した。但し、時間間隔は 12 時間であるので、線形補間を行うものとした。

また、気象データから読み込んだ鉛直風速は利用せず、連続の式を満たすようモデル内で算出した鉛直風速を用いる。つまり、連続の式

$$\text{div} \mathbf{V} = \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial u}{\partial \lambda} + \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} (v \cos \varphi) + \frac{1}{e^{-\zeta}} \frac{\partial}{\partial \zeta} (w e^{-\zeta}) = 0 \quad (1.1-2)$$

を満たすようにするため、水平発散

$$\nabla_H \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial u}{\partial \lambda} + \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} (v \cos \varphi) \quad (1.1-3)$$

を計算し、大気上端で $w=0$ とおいて

$$\frac{1}{e^{-\zeta}} \frac{\partial}{\partial \zeta} (w e^{-\zeta}) = -\nabla_H \cdot \mathbf{v} \quad (1.1-4)$$

を逐次解いて、鉛直風速 w を求める。

④ 数値解法

数値解法：

- 移流項：CUL（キュービック・ラグランジュ）法

計算格子：

- 経度方向：144 個 ($\Delta\lambda=2.5^\circ$)
- 緯度方向：72 個 ($\Delta\phi=2.5^\circ$)
- 鉛直方向：15 個（地表から 30km まで、 $\Delta\zeta=2\text{km}$ ）
- 鉛直座標：対数気圧座標系
- 定義点：スタガード（staggered）格子

時間積分：

- 時間増分：30 分（実行時に変更可）
- 計算対象期間：気象データがある範囲内で実行時に指定。

⑤ 入力データ

3次元化学輸送モデルの入力データは以下のとおり。

- 初期値ファイル（初期時刻における各化学種の体積混合比）
- 地表境界値ファイル（地表における各化学種の体積混合比またはフラックスまたは沈着速度）
- 上端境界値ファイル（大気上端における各化学種の体積混合比またはフラックス）
- パラメータファイル

このうち、パラメータファイルに含まれるデータは以下のとおり。

- 初期時刻・終了時刻・時間増分
- 化学種ごとの計算方法、初期値ファイル名
- 化学種ごとの地表境界条件、地表境界値ファイル名
- 化学種ごとの上端境界条件、上端境界値ファイル名
- 出力時間間隔
- 化学種ごとの出力スイッチ、出力ファイル名

⑥ 出力データ

パラメータファイル中で指定された化学種の体積混合比または数密度（出力スイッチにより選択）

⑦ 言語

Fortran90 を使う。MPI を用いて分散メモリ型の並列化を行う。

今後の拡張性を考慮し、ソースコードを読みやすくする（コメントをつける等）。

(2) 処理アルゴリズム

① 格子点の取り方

緯度、経度ともに 2.5° 刻みのレギュラー格子とする。但し体積混合比 f はセルの中心で定義する (図 1.1-1 参照)。

対象化学種の体積混合比 f の定義点 :

経度方向 : $1.25^\circ, 3.75^\circ, 6.25^\circ, \dots, 178.75^\circ, 181.25^\circ, \dots, 356.25^\circ, 358.75^\circ$ の 144 個 ($\Delta\lambda=2.5^\circ$)

緯度方向 : $-88.75^\circ, -86.25^\circ, \dots, -1.25^\circ, 1.25^\circ, \dots, 86.25^\circ, 88.75^\circ$ の 72 個 ($\Delta\phi=2.5^\circ$)

鉛直方向 : 1km, 3km, 5km, \dots , 27km, 29km の 15 個

② 計算方法

各化学種の濃度の計算方法は、その化学種の反応時定数によって、以下の中から選択した (表 1.1-2 参照)。

1. 場所ごとの値を読み込むだけで計算はしない。
2. 光化学平衡で濃度を計算する。

$$f_i = \frac{P_i}{n_0 L_i} \quad ((1.1-1) \text{式で右辺} = 0 \text{としたもの})$$

3. 局所的に濃度を時間積分する。

$$f_i^{n+1} = \frac{f_i^n + \frac{P_i}{n_0} \Delta t}{1 + L_i \Delta t} \quad ((1.1-1) \text{式で移流項を} 0 \text{としたもの})$$

4. 移流項を含めて濃度を時間積分する (後述)。

但し、ファミリーの化学種についてはファミリー全体を輸送項を含めて時間積分し、ファミリー内については光化学平衡条件を用いて分配を行う。

③ 化学反応の取り扱い

反応速度は以下の方法で計算する。

二体反応の場合 : $k n_A n_B$ (k :反応速度係数、 n_A, n_B :物質 A, B の数密度)

三体反応の場合 : $k n_A n_B n_M$ (M は反応の第三体)

反応速度係数 k は通常、気温の関数である。これらは、NASA JPL がまとめたデータ (De More *et al.*, 1997) ²⁾ を用いる。3次元化学輸送モデルで取り扱う化学反応とその反応速度係数を表 1.1-3 に示す。

④ 光解離の取り扱い

反応速度は以下の方法で計算する。

J_{nA} (J:光解離係数)

光解離係数 J は、大気上端における太陽放射のスペクトル強度 Φ_0 と、解離する分子の吸収断面積 σ を用いて、以下の式で計算する。

$$J = \int \sigma \Phi_0 \exp[-\sec \chi \{ \sigma(O_2)S(O_2) + \sigma(O_3)S(O_3) \}] d\lambda \quad (1.1-5)$$

ここで、 χ は太陽天頂角、 $S(O_2)$ および $S(O_3)$ はそれぞれ、その高度から大気上端までの O_2 および O_3 分子密度の積分量である。

3 次元化学輸送モデルで取り扱う光解離を表 1.1-4 に示す。太陽放射のスペクトル強度 Φ_0 と解離分子の吸収断面積 σ のデータは、NASA JPL がまとめたもの (De More *et al.*, 1997) ²⁾ を用いる。

⑤ 化学種の生成率

各化学種の生成率は、その化学種を生成する化学反応および光解離の反応速度の和として計算する；

$$P_i = \sum_j k_j n_{A_j} n_{B_j} (n_M) + \sum_k J_k n_{A_k} \quad (1.1-6)$$

ここで、 j は i を生成する全ての化学反応で、 A_j 、 B_j はその反応物質、 k は i を生成する全ての光解離で、 A_k はその解離物質である。化学反応に関する項では三体反応の場合のみ M の数密度が加わる。すなわち、

k_j : その化学種を生成する化学反応の反応速度係数

$n_{A_j} n_{B_j}$: その化学種を生成する化学反応に関わる物質の数密度

J_k : 光解離してその化学種を生成する化学種の光解離係数

n_{A_k} : 光解離してその化学種を生成する化学種の数密度

⑥ 化学種の消滅係数

各化学種の消滅係数は、その化学種を消滅する化学反応および光解離の反応速度のうち、自分自身の数密度を除いた部分の和として計算する；

$$L_i = \sum_j k_j n_{A_j} (n_M) + J_i \quad (1.1-7)$$

ここで、 j は i を消滅させる全ての化学反応で、 A_j はその反応物質である。化学反応に関する項では三体反応の場合のみ M の数密度が加わる。すなわち、

k_j : その化学種が消滅する化学反応の反応速度係数

n_{A_j} : その化学種が消滅する化学反応に関わる物質の数密度

J_i : 消滅する化学種の光解離係数

以上をまとめると、化学種 i の生成率 P_i と消滅係数 L_i は次式のようになる：

$$\text{生成率} : P_i = \sum_j k_j n_{A_j} n_{B_j} (n_M) + \sum_k J_k n_{A_k} \quad (1.1-8)$$

(j は i を生成する全ての化学反応で、 A_j 、 B_j はその反応物質、k は i を生成する全ての光解離で、 A_k はその解離物質)

$$\text{消滅係数} : L_i = \sum_j k_j n_{A_j} (n_M) + J_i \quad (1.1-9)$$

(j は i を消滅させる全ての化学反応で、 A_j はその反応物質)

化学反応に関する項では三体反応の場合のみ M の数密度が加わることになる。

⑦ 物質輸送の計算方法

セミラグランジュ法の一つであるキュービック・ラグランジュ (CUL) 法を用いる。

セミラグランジュ法とは、ある時刻における全格子点上の流体粒子が、それぞれ時間 Δt だけ前にどこにいたかをバックワード・トラジェクトリー (流跡線) 解析によって算出し、その位置における化学種の濃度を補間によって求めた後、それが当該格子点に来るまでの光化学反応による濃度の時間変化を求めるやり方であり、この手法を用いた化学輸送モデルが開発されるようになってきている。今回開発する化学輸送モデルでは、時間 Δt だけ前の時刻における位置で補間された化学種の濃度に対し、化学反応による生成・消滅分を増減したものが、現在の格子点上における濃度の値となる。

1次元の場合のセミラグランジュ法は次のようになる (図 1.1-2 参照)。時刻 $t_n + \Delta t$ に地点 x_m (点 C) にたどり着く流体粒子が実線の経路をたどるとする。これを破線で近似する。すなわち、時刻 $t_n - \Delta t$ に A' にいた粒子が C にたどり着くとする。 $F(x, t)$ という量が移流過程でとる値は次の式を解いて求める。

$$F(x_m, t_n + \Delta t) = F(x_m - 2a_m, t_n - \Delta t) \quad (1.1-10)$$

$$a_m = \Delta t U(x_m - a_m, t_n) \quad (1.1-11)$$

但し

$$\frac{dx}{dt} = U(x, t) \quad (1.1-12)$$

式(1.1-11)を満たす a_m を反復法で探し、その粒子は時刻 $t_n - \Delta t$ には位置 $x_m - 2a_m$ にいた(A)として、新しい時刻 $t_n + \Delta t$ における物理量 $F(x_m, t_n + \Delta t)$ を $F(x_m - 2a_m, t_n - \Delta t)$ (これは内挿によって求める) で評価するのである。ここで $U(x-a, t)$ は必ずしも格子点上の速度にはならないが、適当な内挿法によって求める。

キュービック・ラグランジュ (CUL) 法は、計算格子点を 4 点用い 3 次のラグランジュ補間を形成する、セミラグランジュ法の一つである。計算に用いる 4 点は、計算点と風上の 2 点、風下の 1 点である。

一般にセミラグランジュ法は、x 軸上の点 x_i での次のタイムステップ (Δt 秒後) の

値を求める場合に、 x_i から風上方向に $u\Delta t$ さかのぼった点（移流原点）の値がそのまま移流してくると考える。この移流原点での値を求める際に、上記の4点を通る3次多項式によって補間するのが、CUL法の特徴である。

⑧ 境界条件

a) 経度方向

周期境界条件とする。

b) 緯度方向

セミラグランジュ法で極点付近の移流を取り扱う。

c) 高度方向

地表境界、及び上端境界は、それぞれの化学種の性質を考慮して、

- 体積混合比の分布を与える。
- フラックスの分布を与える。
- 沈着速度の分布を与える。

の中から、表 1.1-2 のように選択した。

(3) 性能

① 計算速度

ヒューレット・パッカート社（以下、HP社という）製 ProLiant DL380 G5（Intel Xeon 5160, 3.0GHz）（以下、DL380という）にて、対象化学種（80種）の1日分（ $\Delta t=20$ 分）の濃度計算が、CPU時間92分以内に完了すること。なお、DL380のSPECfp_base2006の値は18.3である。

これは、実際の予測計算を考慮し、80種の化学種についての5年分の予測計算を、8個のCPUを持つ並列計算機で1ヶ月以内に行うために必要な計算速度である。

② 精度

オゾン等の化学種の濃度分布についての計算結果が、NASAの「モデルと観測ワークショップII」の報告書¹⁾等にまとめられている観測値や他のモデルの計算値と比べて妥当な結果が出力されること（各モデルのばらつきの範囲内であること）。

(4) その他

① 拡張性

今後、積雲対流による拡散や湿性沈着過程などの諸過程を追加していくこと等を考慮し、拡張性のある設計とすること。

② 文書化

ユーザが使用するための利用マニュアル、モデルの拡張・修正時に参照できる設計書を添付すること。

表 1.1-1 3次元化学輸送モデル開発計画

	IADF 2次元成層圏モデル	H18年度プロトタイプ	H19年度プロトタイプ	完成モデル
計算領域	緯度：90° N～90° S 高度：0～50km	<u>経度：180° E～180° W</u> 緯度：90° N～90° S 高度：0～50km	経度：180° E～180° W 緯度：90° N～90° S 高度：0～50km	経度：180° E～180° W 緯度：90° N～90° S 高度：0～50km
化学種数	55	1	<u>約 80</u>	約 80
化学反応	150 (成層圏化学中心)	なし	<u>約 250 (成層圏+対流圏)</u>	約 250 (成層圏+対流圏)
光解離係数	○太陽放射強度から直接計算	なし	○太陽放射強度から直接計算	○太陽放射強度から直接計算
積雲対流	×	×	×	○
境界層	×	×	×	○
乾性沈着	×	<u>○</u>	○	○
雲放射	×	×	×	○
湿性沈着	×	×	×	○
気象データ	気候値 (残差循環)	ECMWF (または JMA) 解析データ	ECMWF (または JMA) 解析データ	任意 (前処理により NetCDF 化)
数値解法	反復風上差分	<u>セミラグランジュ法</u>	<u>CUL法</u>	CUL法
並列化対応	×	<u>○ (共有メモリ)</u>	<u>○ (MPI)</u>	○ (MPI)
初期化	×	×	×	○
データ同化	×	×	×	○

(注)○：実装されている、×：実装されていない。下線箇所が当該年度に開発する部分。

表 1.1-2 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学種

計算順序	化学種	計算方法	地表境界条件	上端境界条件
1	O _x	連続の式	沈着速度	フラックス
2	O ₃	ファミリー	—	—
3	O	ファミリー	—	—
4	O(¹ D)	ファミリー	—	—
5	N ₂ O	連続の式	濃度	フラックス
6	NO _y	連続の式	濃度	フラックス
7	N	光化学平衡	濃度	フラックス
8	NO _x	連続の式	沈着速度	フラックス
9	NO	ファミリー	—	—
10	NO ₂	ファミリー	—	—
11	NO ₃	連続の式	濃度	フラックス
12	HNO ₃	連続の式	沈着速度	フラックス
13	HO ₂ NO ₂	連続の式	沈着速度	フラックス
14	N ₂ O ₅	連続の式	濃度	フラックス
15	HONO	連続の式	濃度	フラックス
16	CH ₄	連続の式	濃度	フラックス
17	CH ₃	光化学平衡	濃度	フラックス
18	CH ₃ O ₂	連続の式	濃度	フラックス
19	CH ₃ OOH	連続の式	濃度	フラックス
20	CH ₃ O	連続の式	濃度	フラックス
21	CH ₂ O	連続の式	濃度	フラックス
22	CHO	光化学平衡	濃度	フラックス
23	CO	連続の式	沈着速度	フラックス
24	HO _x	連続の式	沈着速度	フラックス
25	OH	ファミリー	—	—
26	HO ₂	ファミリー	—	—
27	H	ファミリー	—	—
28	H ₂ O ₂	連続の式	沈着速度	フラックス
29	C ₃ H ₆	局所積分	濃度	フラックス
30	ISOP (C ₅ H ₈)	局所積分	濃度	フラックス
31	PO ₂ (C ₃ H ₆ OHO ₂)	局所積分	濃度	フラックス
32	CH ₃ CHO	局所積分	濃度	フラックス

計算順序	化学種	計算方法	地表境界条件	上端境界条件
33	POOH (C ₃ H ₆ OHOOH)	局所積分	濃度	フラックス
34	CH ₃ CO ₃	局所積分	濃度	フラックス
35	CH ₃ COOOH	局所積分	濃度	フラックス
36	PAN (CH ₃ CO ₃ NO ₂)	局所積分	沈着速度	フラックス
37	ONIT (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OHNO)	局所積分	濃度	フラックス
38	C ₂ H ₆	局所積分	濃度	フラックス
39	C ₂ H ₄	局所積分	濃度	フラックス
40	C ₄ H ₁₀	局所積分	濃度	フラックス
41	MPAN (CH ₂ CCH ₃ CO ₃ NO ₂)	局所積分	濃度	フラックス
42	ISOPO ₂ (HOCH ₂ COOCH ₃ CHCH ₂)	局所積分	濃度	フラックス
43	MVK (CH ₂ CHCOCH ₃)	局所積分	濃度	フラックス
44	MACR (CH ₂ CCH ₃ CHO)	局所積分	濃度	フラックス
45	MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH)	局所積分	濃度	フラックス
46	MACROOH (CH ₃ COCHOOHCH ₂ OH)	局所積分	濃度	フラックス
47	MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃)	局所積分	濃度	フラックス
48	C ₂ H ₅ O ₂	局所積分	濃度	フラックス
49	C ₂ H ₅ OOH	局所積分	濃度	フラックス
50	C ₁₀ H ₁₆	局所積分	濃度	フラックス
51	C ₃ H ₈	局所積分	濃度	フラックス
52	C ₃ H ₇ O ₂	局所積分	濃度	フラックス
53	C ₃ H ₇ OOH	局所積分	濃度	フラックス
54	CH ₃ COCH ₃	局所積分	濃度	フラックス
55	ROOH (CH ₃ COCH ₂ OOH)	局所積分	濃度	フラックス
56	CH ₃ OH	局所積分	沈着速度	フラックス
57	C ₂ H ₅ OH	局所積分	沈着速度	フラックス
58	GLYALD (HOCH ₂ CHO)	局所積分	濃度	フラックス
59	HYAC (CH ₃ COCH ₂ OH)	局所積分	濃度	フラックス
60	EO ₂ (HOCH ₂ CH ₂ O ₂)	局所積分	濃度	フラックス
61	EO (HOCH ₂ CH ₂ O)	局所積分	濃度	フラックス

計算順序	化学種	計算方法	地表境界条件	上端境界条件
62	HYDRALD (HOCH ₂ CCH ₃ CHCHO)	局所積分	濃度	フラックス
63	RO ₂ (CH ₃ COCH ₂ O ₂)	局所積分	濃度	フラックス
64	CH ₃ COCHO	局所積分	濃度	フラックス
65	ISOPNO ₃ (CH ₂ CHCCH ₃ OOCH ₂ ONO ₂)	局所積分	濃度	フラックス
66	ONITR (CH ₂ CCH ₃ CHONO ₂ CH ₂ OH)	局所積分	濃度	フラックス
67	XO ₂ (HOCH ₂ COOCH ₃ CHCHOH)	局所積分	濃度	フラックス
68	XOOH (HOCH ₂ COOHCH ₃ CHCHOH)	局所積分	濃度	フラックス
69	ISOPOOH (HOCH ₂ COOHCH ₃ CHCH ₂)	局所積分	濃度	フラックス
70	H ₂	連続の式	濃度	フラックス
71	CH ₃ Cl	連続の式	濃度	フラックス
72	CCl ₄	連続の式	濃度	フラックス
73	CF ₃ Cl	連続の式	濃度	フラックス
74	CF ₂ Cl ₂	連続の式	濃度	フラックス
75	CH ₃ CCl ₃	連続の式	濃度	フラックス
76	ClO _x	連続の式	沈着速度	フラックス
77	Cl	ファミリー	—	—
78	ClO	ファミリー	—	—
79	HCl	連続の式	濃度	フラックス
80	HOCl	連続の式	濃度	フラックス
81	ClONO ₂	連続の式	濃度	フラックス
82	Cl ₂	連続の式	濃度	フラックス
83	OCIO	連続の式	濃度	フラックス
84	Cl ₂ O ₂	連続の式	濃度	フラックス
85	ClNO ₂	連続の式	濃度	フラックス
86	CH ₃ Br	連続の式	濃度	フラックス
87	BrO _x	連続の式	沈着速度	フラックス
88	Br	ファミリー	—	—
89	BrO	ファミリー	—	—

計算順序	化学種	計算方法	地表境界条件	上端境界条件
90	HBr	連続の式	濃度	フラックス
91	HOBr	連続の式	濃度	フラックス
92	BrONO ₂	連続の式	濃度	フラックス
93	BrCl	連続の式	濃度	フラックス

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
1	$O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$	$6.0E-34*(300/T)^{2.4}$	
2	$O + O_3 \rightarrow 2*O_2$	$8.0E-12*\exp(-2060/T)$	
3	$O(^1D) + N_2 \rightarrow O + N_2$	$1.8E-11*\exp(110/T)$	
4	$O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2$	$3.2E-11*\exp(70/T)$	
5	$O(^1D) + H_2O \rightarrow 2*OH$	$2.2E-10$	
6	$N_2O + O(^1D) \rightarrow 2*NO$	$6.7E-11$	
7	$N_2O + O(^1D) \rightarrow N_2 + O_2$	$4.9E-11$	
8	$NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH$	$3.5E-12*\exp(250/T)$	
9	$NO + O_3 \rightarrow NO_2 + O_2$	$3.0E-12*\exp(-1500/T)$	
10	$NO_2 + O \rightarrow NO + O_2$	$5.6E-12*\exp(180/T)$	
11	$NO_2 + O_3 \rightarrow NO_3 + O_2$	$1.2E-13*\exp(-2450/T)$	
12	$NO_3 + HO_2 \rightarrow OH + NO_2$	$2.3E-12*\exp(170/T)$	
13	$NO_2 + NO_3 + M \rightarrow N_2O_5 + M$	$k_0=2.0E-30*(300/T)^{4.4}$ $k_\infty=1.4E-12*(300/T)^{0.7}$ $F=0.6$	b
14	$N_2O_5 + M \rightarrow NO_2 + NO_3 + M$	$K_{eq}=3.0E-27*\exp(10991/T)$	c
15	$NO_2 + OH + M \rightarrow HNO_3 + M$	$k_0=2.4E-30*(300/T)^{3.1}$ $k_\infty=1.7E-11*(300/T)^{2.1}$ $F=0.6$	b
16	$HNO_3 + OH \rightarrow NO_3 + H_2O$	$k_0=2.4E-14*\exp(460/T)$ $k_2=2.7E-17*\exp(2199/T)$ $k_3=6.5E-34*\exp(1335/T)$ $k=k_0+k_3[M]/(1+k_3[M]/k_2)$	
17	$NO_3 + NO \rightarrow 2*NO_2$	$1.5E-11*\exp(170/T)$	
18	$NO_2 + HO_2 + M \rightarrow HO_2NO_2 + M$	$k_0=1.8E-31*(300/T)^{3.2}$ $k_\infty=4.7E-12*(300/T)^{1.4}$ $F=0.6$	b
19	$HO_2NO_2 + OH \rightarrow H_2O + NO_2 + O_2$	$1.3E-12*\exp(380/T)$	
20	$HO_2NO_2 + M \rightarrow HO_2 + NO_2 + M$	$K_{eq}=2.1E-27*\exp(10900/T)$	c
21	$CH_4 + OH \rightarrow CH_3O_2 + H_2O$	$2.45E-12*\exp(-1775/T)$	
22	$CH_4 + O(^1D) \rightarrow .75*CH_3O_2 + .75*OH$ $+ .25*CH_2O + .4*HO_2 + .05*H_2$	$1.5E-10$	

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
23	$\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{NO}_2 + \text{HO}_2$	$3.0\text{E}\cdot 12 \cdot \exp(280/T)$	
24	$\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow 2 \cdot \text{CH}_2\text{O} + 2 \cdot \text{HO}_2$	$5.0\text{E}\cdot 13 \cdot \exp(-424/T)$	
25	$\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_3\text{OH}$	$1.9\text{E}\cdot 14 \cdot \exp(706/T)$	
26	$\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OOH} + \text{O}_2$	$3.8\text{E}\cdot 13 \cdot \exp(800/T)$	
27	$\text{CH}_3\text{OOH} + \text{OH} \rightarrow .7 \cdot \text{CH}_3\text{O}_2 + .3 \cdot \text{OH}$ $+ .3 \cdot \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	$3.8\text{E}\cdot 12 \cdot \exp(200/T)$	
28	$\text{CH}_2\text{O} + \text{NO}_3 \rightarrow \text{CO} + \text{HO}_2 + \text{HNO}_3$	$6.0\text{E}\cdot 13 \cdot \exp(-2058/T)$	
29	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	$1.0\text{E}\cdot 11$	
30	$\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{HO}_2$	$1.5\text{E}\cdot 13 \cdot (1 + .6 \cdot P_{\text{atm}})$	
31	$\text{H}_2 + \text{O}(^1\text{D}) \rightarrow \text{HO}_2 + \text{OH}$	$1.1\text{E}\cdot 10$	
32	$\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{O}_2$	$2.2\text{E}\cdot 11 \cdot \exp(120/T)$	
33	$\text{HO}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	$3.0\text{E}\cdot 11 \cdot \exp(200/T)$	
34	$\text{OH} + \text{O}_3 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{O}_2$	$1.5\text{E}\cdot 12 \cdot \exp(-880/T)$	
35	$\text{HO}_2 + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH} + 2 \cdot \text{O}_2$	$2.0\text{E}\cdot 14 \cdot \exp(-680/T)$	
36	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2$	$\{2.3\text{E}\cdot 13 \cdot \exp(600/T)$ $+ 1.7\text{E}\cdot 33 \cdot [\text{M}] \cdot \exp(1000/T)\} \cdot$ $(1 + 1.4\text{E}\cdot 21 \cdot \exp(2200/T))$ $\cdot [\text{H}_2\text{O}]$	
37	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	$2.9\text{E}\cdot 12 \cdot \exp(-160/T)$	
38	$\text{OH} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$4.8\text{E}\cdot 11 \cdot \exp(250/T)$	
39	$\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$4.2\text{E}\cdot 12 \cdot \exp(-240/T)$	
40	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	$5.5\text{E}\cdot 12 \cdot \exp(-2000/T)$	
41	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH} + \text{M} \rightarrow \text{PO}_2(\text{C}_3\text{H}_6\text{OHO}_2) + \text{M}$	$k_0 = 8.0\text{E}\cdot 27 \cdot (300/T)^{3.5}$ $k_\infty = 3.0\text{E}\cdot 11$ $F = 0.5$	b
42	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{O}_3 \rightarrow .54 \cdot \text{CH}_2\text{O} + .19 \cdot \text{HO}_2$ $+ .33 \cdot \text{OH} + .08 \cdot \text{CH}_4 + .56 \cdot \text{CO}$ $+ .5 \cdot \text{CH}_3\text{CHO} + .31 \cdot \text{CH}_3\text{O}_2$ $+ .25 \cdot \text{CH}_3\text{COOH}$	$6.5\text{E}\cdot 15 \cdot \exp(-1900/T)$	
43	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{NO}_3 \rightarrow$ $\text{ONIT}(\text{CH}_3\text{COCHO}_2\text{CH}_2\text{OHNO})$	$4.6\text{E}\cdot 13 \cdot \exp(-1156/T)$	
44	$\text{PO}_2(\text{C}_3\text{H}_6\text{OHO}_2) + \text{NO} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO} +$ $\text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2 + \text{NO}_2$	$4.2\text{E}\cdot 12 \cdot \exp(180/T)$	

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
45	$\text{PO}_2(\text{C}_3\text{H}_6\text{OHO}_2) + \text{HO}_2 \rightarrow \text{POOH}(\text{C}_3\text{H}_6\text{OHOOH}) + \text{O}_2$	$7.5\text{E-}13 \cdot \exp(700/T)$	
46	$\text{POOH}(\text{C}_3\text{H}_6\text{OHOOH}) + \text{OH} \rightarrow .5 \cdot \text{PO}_2(\text{C}_3\text{H}_6\text{OHO}_2) + .5 \cdot \text{OH} + .5 \cdot \text{HYAC}(\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{OH}) + \text{H}_2\text{O}$	$3.8\text{E-}12 \cdot \exp(200/T)$	
47	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{H}_2\text{O}$	$5.6\text{E-}12 \cdot \exp(270/T)$	
48	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{NO}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{HNO}_3$	$1.4\text{E-}12 \cdot \exp(-1900/T)$	
49	$\text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{NO} \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{CO}_2 + \text{NO}_2$	$8.1\text{E-}12 \cdot \exp(270/T)$	
50	$\text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{NO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{PAN}(\text{CH}_3\text{CO}_3\text{NO}_2) + \text{M}$	$k_0=8.5\text{E-}29 \cdot (300/T)^{6.5}$ $k_\infty=1.1\text{E-}11 \cdot (300/T)$ $F=0.6$	b
51	$\text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow .7 \cdot \text{CH}_3\text{COOOH} + .3 \cdot \text{CH}_3\text{COOH} + .3 \cdot \text{O}_3$	$4.3\text{E-}13 \cdot \exp(1040/T)$	
52	$\text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow .9 \cdot \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{CH}_2\text{O} + .9 \cdot \text{HO}_2 + .9 \cdot \text{CO}_2 + .1 \cdot \text{CH}_3\text{COOH}$	$1.3\text{E-}12 \cdot \exp(640/T)$	
53	$\text{CH}_3\text{COOOH} + \text{OH} \rightarrow .5 \cdot \text{CH}_3\text{CO}_3 + .5 \cdot \text{CH}_2\text{O} + .5 \cdot \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$1.0\text{E-}12$	
54	$\text{PAN}(\text{CH}_3\text{CO}_3\text{NO}_2) + \text{M} \rightarrow \text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{NO}_2 + \text{M}$	$K_{\text{eq}}=9.0\text{E-}29 \cdot \exp(14000/T)$	c
55	$\text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{CH}_3\text{CO}_3 \rightarrow 2 \cdot \text{CH}_3\text{O}_2 + 2 \cdot \text{CO}_2$	$2.5\text{E-}12 \cdot \exp(500/T)$	
56	$\text{ISOP}(\text{C}_5\text{H}_8) + \text{O}_3 \rightarrow .4 \cdot \text{MACR}(\text{CH}_2\text{CCH}_3\text{CHO}) + .2 \cdot \text{MVK}(\text{CH}_2\text{CHCOCH}_3) + .07 \cdot \text{C}_3\text{H}_6 + .27 \cdot \text{OH} + .06 \cdot \text{HO}_2 + .6 \cdot \text{CH}_2\text{O} + .3 \cdot \text{CO} + .1 \cdot \text{O}_3 + .2 \cdot \text{MCO}_3(\text{CH}_2\text{CCH}_3\text{CO}_3) + .2 \cdot \text{CH}_3\text{COOH}$	$1.05\text{E-}14 \cdot \exp(-2000/T)$	
57	$\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$8.7\text{E-}12 \cdot \exp(-1070/T)$	
58	$\text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO} + \text{HO}_2 + \text{NO}_2$	$2.6\text{E-}12 \cdot \exp(365/T)$	
59	$\text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{OOH} + \text{O}_2$	$7.5\text{E-}13 \cdot \exp(700/T)$	
60	$\text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2 + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow .7 \cdot \text{CH}_2\text{O} + .8 \cdot \text{CH}_3\text{CHO} + \text{HO}_2 + .3 \cdot \text{CH}_3\text{OH} + .2 \cdot \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	$2.0\text{E-}13$	
61	$\text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2 + \text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2 \rightarrow 1.6 \cdot \text{CH}_3\text{CHO} + 1.2 \cdot \text{HO}_2 + .4 \cdot \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	$6.8\text{E-}14$	

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
62	$C_2H_5OOH + OH \rightarrow .5 * C_2H_5O_2$ $+ .5 * CH_3CHO + .5 * OH$	$3.8E-12 * \exp(200/T)$	
63	$OH + C_2H_4 + M \rightarrow .75 * EO_2(HOCH_2CH_2O_2)$ $+ .5 * CH_2O + .25 * HO_2 + M$	$k_0 = 1.0E-28 * (300/T)^{0.8}$ $k_\infty = 8.8E-12$ $F = 0.6$	b
64	$EO_2(HOCH_2CH_2O_2) + NO \rightarrow$ $EO(HOCH_2CH_2O) + NO_2$	$4.2E-12 * \exp(180/T)$	
65	$EO(HOCH_2CH_2O) + O_2 \rightarrow$ $GLYALD(HOCH_2CHO) + HO_2$	$1.0E-14$	
66	$EO(HOCH_2CH_2O) \rightarrow 2 * CH_2O + HO_2$	$1.6E+11 * \exp(-4150/T)$	
67	$O_3 + C_2H_4 \rightarrow CH_2O + .12 * HO_2 + .5 * CO$ $+ .12 * OH + .32 * CH_3COOH$	$1.2E-14 * \exp(-2630/T)$	
68	$ISOP(C_5H_8) + OH \rightarrow$ $ISOPO_2(HOCH_2COOCH_3CHCH_2)$	$2.54E-11 * \exp(410/T)$	
69	$C_4H_{10} + OH \rightarrow 1.33 * C_3H_7O_2$	$1.55E-11 * \exp(-540/T)$	
70	$ISOPO_2(HOCH_2COOCH_3CHCH_2) + NO$ $\rightarrow .08 * ONITR(CH_2CCH_3CHONO_2CH_2OH)$ $+ .92 * NO_2 + HO_2 + .51 * CH_2O$ $+ .23 * MACR(CH_2CCH_3CHO)$ $+ .32 * MVK(CH_2CHCOCH_3)$ $+ .37 * HYDRALD(HOCH_2CCH_3CHCHO)$	$2.2E-12 * \exp(180/T)$	
71	$ISOPO_2(HOCH_2COOCH_3CHCH_2) + NO_3 \rightarrow$ $HO_2 + NO_2 + .6 * CH_2O$ $+ .25 * MACR(CH_2CCH_3CHO)$ $+ .35 * MVK(CH_2CHCOCH_3)$ $+ .4 * HYDRALD(HOCH_2CCH_3CHCHO)$	$2.4E-12$	
72	$ISOPO_2(HOCH_2COOCH_3CHCH_2) + HO_2 \rightarrow$ $ISOPOOH(HOCH_2COOHCH_3CHCH_2)$	$8.0E-13 * \exp(700/T)$	
73	$ISOPO_2(HOCH_2COOCH_3CHCH_2) + CH_3O_2$ $\rightarrow .25 * CH_3OH + HO_2 + 1.2 * CH_2O$ $+ .19 * MACR(CH_2CCH_3CHO)$ $+ .26 * MVK(CH_2CHCOCH_3)$ $+ .3 * HYDRALD(HOCH_2CCH_3CHCHO)$	$5.0E-13 * \exp(400/T)$	

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
74	ISOPO ₂ (HOCH ₂ COOCH ₃ CHCH ₂) + CH ₃ CO ₃ → CH ₃ O ₂ + HO ₂ + .6*CH ₂ O + .25*MACR(CH ₂ CCH ₃ CHO) + .35*MVK(CH ₂ CHCOCH ₃) + .4*HYDRALD(HOCH ₂ CCH ₃ CHCHO)	1.4E-11	
75	MVK(CH ₂ CHCOCH ₃) + OH → MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH)	4.13E-12*exp(452/T)	
76	MVK(CH ₂ CHCOCH ₃) + O ₃ → .8*CH ₂ O + .95*CH ₃ COCHO + .08*OH + .2*O ₃ + .06*HO ₂ + .05*CO + .04*CH ₃ CHO	7.52E-16*exp(-1521/T)	
77	MACR(CH ₂ CCH ₃ CHO) + OH → .5*MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH) + .5*H ₂ O + .5*MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃)	1.86E-11*exp(175/T)	
78	MACR(CH ₂ CCH ₃ CHO) + O ₃ → .8*CH ₃ COCHO + .275*HO ₂ + .2*CO + .2*O ₃ + .7*CH ₂ O + .215*OH	4.4E-15*exp(-2500/T)	
79	MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH) + NO → NO ₂ + .47*HO ₂ + .25*CH ₂ O + .25*CH ₃ COCHO + .53*CH ₃ CO ₃ + .53*GLYALD(HOCH ₂ CHO) + .22*HYAC(CH ₃ COCH ₂ OH) + .22*CO	2.7E-12*exp(360/T)	
80	MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH) + NO → ONITR(CH ₂ CCH ₃ CHONO ₂ CH ₂ OH)	1.3E-13*exp(360/T)	
81	MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH) + NO ₃ → NO ₂ + .47*HO ₂ + .25*CH ₂ O + .25*CH ₃ COCHO + .22*CO + .53*GLYALD(HOCH ₂ CHO) + .22*HYAC(CH ₃ COCH ₂ OH) + .53*CH ₃ CO ₃	2.4E-12	
82	MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH) + HO ₂ → MACROOH(CH ₃ COCHO ₂ OHCH ₂ OH)	8.0E-13*exp(700/T)	

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
83	MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH) + CH ₃ O ₂ → .73*HO ₂ + .88*CH ₂ O + .11*CO + .24*CH ₃ COCHO + .26*GLYALD(HOCH ₂ CHO) + .26*CH ₃ CO ₃ + .25*CH ₃ OH + .23*HYAC(CH ₃ COCH ₂ OH)	5.0E-13*exp(400/T)	
84	MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH) + CH ₃ CO ₃ → .25*CH ₃ COCHO + CH ₃ O ₂ + .22*CO + .47*HO ₂ + .53*GLYALD(HOCH ₂ CHO) + .22*HYAC(CH ₃ COCH ₂ OH) + .25*CH ₂ O + .53*CH ₃ CO ₃	1.4E-11	
85	MACROOH(CH ₃ COCHOOHCH ₂ OH) + OH → .5*MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) + .2*MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH) + .1*OH + .2*HO ₂	2.3E-11*exp(200/T)	
86	MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) + NO → NO ₂ + CH ₂ O + CH ₃ CO ₃	5.3E-12*exp(360/T)	
87	MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) + NO ₃ → NO ₂ + CH ₂ O + CH ₃ CO ₃	5.0E-12	
88	MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) + HO ₂ → .3*O ₃ + .3*CH ₃ COOH + .7*CH ₃ COOOH + .7*O ₂	4.3E-13*exp(1040/T)	
89	MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) + CH ₃ O ₂ → 2*CH ₂ O + HO ₂ + CO ₂ + CH ₃ CO ₃	1.3E-12*exp(640/T)	
90	MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) + CH ₃ CO ₃ → 2*CO ₂ + CH ₃ O ₂ + CH ₂ O + CH ₃ CO ₃	4.6E-12*exp(530/T)	
91	MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) + MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) → 2*CO ₂ + 2*CH ₂ O + 2*CH ₃ CO ₃	2.3E-12*exp(530/T)	
92	MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) + NO ₂ (+M) → MPAN(CH ₂ CCH ₃ CO ₃ NO ₂) (+M)	1.1E-11*(300/T)	
93	MPAN(CH ₂ CCH ₃ CO ₃ NO ₂) + M → MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃) + NO ₂ + M	K _{eq} =9.0E-29*exp(14000/T)	c

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
94	$C_{10}H_{16} + OH \rightarrow 1.64*$ ISOPO ₂ (HOCH ₂ COOCH ₃ CHCH ₂) + 0.1*CH ₃ COCH ₃	1.2E-11*exp(444/T)	
95	$C_{10}H_{16} + O_3 \rightarrow$ 1.122*MACR(CH ₂ CCH ₃ CHO) + .442*MVK(CH ₂ CHCOCH ₃) + .765*O + 1.156*OH + .119*C ₃ H ₆ + 1.326*CH ₂ O + .323*CO + .102*HO ₂	9.9E-15*exp(-730/T)	
96	$C_{10}H_{16} + NO_3 \rightarrow$ 1.7*ISOPO ₂ (HOCH ₂ COOCH ₃ CHCH ₂) + NO ₂	5.6E-11*exp(-650/T)	
97	$N + O_2 \rightarrow NO + O$	1.5E-11*exp(-3600/T)	
98	$N + NO \rightarrow N_2 + O$	2.1E-11*exp(100/T)	
99	$C_3H_8 + OH \rightarrow C_3H_7O_2 + H_2O$	1.0E-11*exp(-660/T)	
100	$C_3H_7O_2 + NO \rightarrow .82*CH_3COCH_3 + NO_2 +$ HO ₂ + .27*CH ₃ CHO	4.2E-12*exp(180/T)	
101	$C_3H_7O_2 + HO_2 \rightarrow C_3H_7OOH + O_2$	7.5E-13*exp(700/T)	
102	$C_3H_7O_2 + CH_3O_2 \rightarrow CH_2O + HO_2$ + .82*CH ₃ COCH ₃	3.75E-13*exp(-40/T)	
103	$C_3H_7OOH + OH \rightarrow H_2O + C_3H_7O_2$	3.8E-12*exp(200/T)	
104	$CH_3COCH_3 + OH \rightarrow RO_2(CH_3COCH_2O_2) +$ H ₂ O	8.8E-12*exp(-1320/T) +1.7E-14*exp(423/T)	
105	$RO_2(CH_3COCH_2O_2) + NO \rightarrow CH_3CO_3 +$ CH ₂ O + NO ₂	4.2E-12*exp(180/T)	
106	$RO_2(CH_3COCH_2O_2) + HO_2 \rightarrow$ ROOH(CH ₃ COCH ₂ OOH) + O ₂	7.5E-13*exp(700/T)	
107	$ROOH(CH_3COCH_2OOH) + OH \rightarrow$ RO ₂ (CH ₃ COCH ₂ O ₂) + H ₂ O	3.8E-12*exp(200/T)	
108	$ONIT(CH_3COCHO_2CH_2OHNO) + OH \rightarrow$ NO ₂ + CH ₃ COCHO	6.8E-13	
109	$ISOP(C_5H_8) + NO_3 \rightarrow$ ISOPNO ₃ (CH ₂ CHCCH ₃ OOCH ₂ ONO ₂)	3.03E-12*exp(-446/T)	

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
110	ISOPNO ₃ (CH ₂ CHCCH ₃ OOCH ₂ ONO ₂) + NO → 1.206*NO ₂ + .794*HO ₂ + .072*CH ₂ O + .167*MACR(CH ₂ CCH ₃ CHO) + .039*MVK(CH ₂ CHCOCH ₃) + .794*ONITR(CH ₂ CCH ₃ CHONO ₂ CH ₂ OH)	2.7E-12*exp(360/T)	
111	ISOPNO ₃ (CH ₂ CHCCH ₃ OOCH ₂ ONO ₂) + NO ₃ → 1.206*NO ₂ + .072*CH ₂ O + .167*MACR(CH ₂ CCH ₃ CHO) + .039*MVK(CH ₂ CHCOCH ₃) + .794*ONITR(CH ₂ CCH ₃ CHONO ₂ CH ₂ OH) + .794*HO ₂	2.4E-12	
112	ISOPNO ₃ (CH ₂ CHCCH ₃ OOCH ₂ ONO ₂) + HO ₂ → XOOH(HOCH ₂ COOHCH ₃ CHCHOH) + .206*NO ₂ + .794*HO ₂ + .008*CH ₂ O + .167*MACR(CH ₂ CCH ₃ CHO) + .039*MVK(CH ₂ CHCOCH ₃) + .794*ONITR(CH ₂ CCH ₃ CHONO ₂ CH ₂ OH)	8.0E-13*exp(700/T)	
113	CH ₃ COCHO + OH → CH ₃ CO ₃ + CO + H ₂ O	8.4E-13*exp(830/T)	
114	CH ₃ COCHO + NO ₃ → HNO ₃ + CO + CH ₃ CO ₃	1.4E-12*exp(-1860/T)	
115	ONITR(CH ₂ CCH ₃ CHONO ₂ CH ₂ OH) + OH → .5*CO + .5*CH ₂ O + HYDRALD(HOCH ₂ CCH ₃ CHCHO) + NO ₂ + HO ₂	1.5E-11	
116	ONITR(CH ₂ CCH ₃ CHONO ₂ CH ₂ OH) + NO ₃ → HO ₂ + NO ₂ + HYDRALD(HOCH ₂ CCH ₃ CHCHO)	1.4E-12*exp(-1860/T)	
117	OH + HYDRALD(HOCH ₂ CCH ₃ CHCHO) → XO ₂ (HOCH ₂ COOCH ₃ CHCHOH)	1.86E-11*exp(175/T)	

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
118	$XO_2(HOCH_2COOCH_3CHCHOH) + NO \rightarrow$ $NO_2 + 1.5*HO_2 + CO$ $+ .25*HYAC(CH_3COCH_2OH)$ $+ .25*CH_3COCHO$ $+ .25*GLYALD(HOCH_2CHO)$	$2.7E-12*exp(360/T)$	
119	$XO_2(HOCH_2COOCH_3CHCHOH) + NO_3 \rightarrow$ $NO_2 + 1.5*HO_2 + CO$ $+ .25*HYAC(CH_3COCH_2OH)$ $+ .25*CH_3COCHO$ $+ .25*GLYALD(HOCH_2CHO)$	$2.4E-12$	
120	$XO_2(HOCH_2COOCH_3CHCHOH) + HO_2 \rightarrow$ $XOOH(HOCH_2COOHCH_3CHCHOH)$	$8.0E-13*exp(700/T)$	
121	$XO_2(HOCH_2COOCH_3CHCHOH) + CH_3O_2$ $\rightarrow .3*CH_3OH + HO_2 + .7*CH_2O + .4*CO$ $+ .1*HYAC(CH_3COCH_2OH)$ $+ .1*CH_3COCHO$ $+ .1*GLYALD(HOCH_2CHO)$	$5.0E-13*exp(400/T)$	
122	$XO_2(HOCH_2COOCH_3CHCHOH) + CH_3CO_3$ $\rightarrow CO + CH_3O_2 + 1.5*HO_2$ $+ .25*HYAC(CH_3COCH_2OH)$ $+ .25*CH_3COCHO$ $+ .25*GLYALD(HOCH_2CHO)$	$1.3E-12*exp(640/T)$	
123	$XOOH(HOCH_2COOHCH_3CHCHOH) + OH$ $\rightarrow H_2O + XO_2(HOCH_2COOCH_3CHCHOH)$	$1.9E-12*exp(190/T)$	
124	$XOOH(HOCH_2COOHCH_3CHCHOH) + OH$ $\rightarrow H_2O + OH$	$7.69E-17*T^2*exp(253/T)$	
125	$ISOPOOH(HOCH_2COOHCH_3CHCH_2) +$ $OH \rightarrow .5*XO_2(HOCH_2COOCH_3CHCHOH)$ $+ .5* ISOPO_2(HOCH_2COOCH_3CHCH_2)$	$3.8E-12*exp(200/T)$	
126	$OH + CH_3OH \rightarrow HO_2 + CH_2O$	$6.7E-12*exp(-600/T)$	
127	$OH + C_2H_5OH \rightarrow HO_2 + CH_3CHO$	$7.0E-12*exp(-235/T)$	
128	$OH + MPAN(CH_2CCH_3CO_3NO_2)$ $\rightarrow .5*HYAC(CH_3COCH_2OH) + .5*NO_3$ $+ .5*CH_2O + .5*HO_2$	$k_0=8.0E-27*(300/T)^{3.5}$ $k_\infty=3.0E-11$ $F=0.5$	b

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
129	$\text{OH} + \text{PAN}(\text{CH}_3\text{CO}_3\text{NO}_2) \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{NO}_3$	4.0E-14	
130	$\text{OH} + \text{HYAC}(\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{OH}) \rightarrow \text{CH}_3\text{COCHO} + \text{HO}_2$	3.0E-12	
131	$\text{OH} + \text{GLYALD}(\text{HOCH}_2\text{CHO}) \rightarrow .8*\text{MCO}_3(\text{CH}_2\text{CCH}_3\text{CO}_3) + .4*\text{CO} + .6*\text{HO}_2$	1.0E-11	
132	$\text{Cl} + \text{O}_3 \rightarrow \text{ClO} + \text{O}_2$	$2.9\text{E-}11*\exp(-260/\text{T})$	
133	$\text{ClO} + \text{O} \rightarrow \text{Cl} + \text{O}_2$	$3.0\text{E-}11*\exp(70/\text{T})$	
134	$\text{ClO} + \text{NO} \rightarrow \text{Cl} + \text{NO}_2$	$6.4\text{E-}12*\exp(290/\text{T})$	
135	$\text{ClO} + \text{NO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{ClONO}_2 + \text{M}$	$k_0=1.8\text{E-}31*(300/\text{T})^{3.4}$ $k_\infty=1.5\text{E-}11$ $F=1.9$	b
136	$\text{ClO} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{HOCl} + \text{O}_2$	$4.8\text{E-}13*\exp(700/\text{T})$	
137	$\text{ClO} + \text{OH} \rightarrow \text{Cl} + \text{HO}_2$	$1.1\text{E-}11*\exp(120/\text{T})$	
138	$\text{ClO} + \text{ClO} + \text{M} \rightarrow \text{Cl}_2\text{O}_2 + \text{M}$	$k_0=2.2\text{E-}32*(300/\text{T})^{3.1}$ $k_\infty=3.5\text{E-}12$ $F=1.0$	b
139	$\text{Cl}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{ClO} + \text{ClO} + \text{M}$	$K_{\text{eq}}=1.27\text{E-}27*\exp(8744/\text{T})$	c
140	$\text{Cl} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{HCl} + \text{CH}_3$	$1.1\text{E-}11*\exp(-1400/\text{T})$	
141	$\text{Cl} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{HCl} + \text{O}_2$	$1.8\text{E-}11*\exp(170/\text{T})$	
142	$\text{Cl} + \text{H}_2 \rightarrow \text{HCl} + \text{H}$	$3.7\text{E-}11*\exp(-2300/\text{T})$	
143	$\text{Cl} + \text{NO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{ClNO}_2 + \text{M}$	$k_0=1.8\text{E-}31*(300/\text{T})^{2.0}$ $k_\infty=1.0\text{E-}10$ $F=1.0$	b
144	$\text{Cl} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{HCl} + \text{HO}_2$	$1.1\text{E-}11*\exp(-980/\text{T})$	
145	$\text{Cl} + \text{CH}_2\text{O} \rightarrow \text{HCl} + \text{CHO}$	$8.1\text{E-}11*\exp(-30/\text{T})$	
146	$\text{HCl} + \text{OH} \rightarrow \text{Cl} + \text{H}_2\text{O}$	$2.6\text{E-}12*\exp(-350/\text{T})$	
147	$\text{HCl} + \text{O} \rightarrow \text{Cl} + \text{OH}$	$1.0\text{E-}11*\exp(-3300/\text{T})$	
148	$\text{HOCl} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{ClO}$	$3.0\text{E-}12*\exp(-500/\text{T})$	
149	$\text{HOCl} + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{ClO}$	$2.1\text{E-}10*\exp(-2200/\text{T})$	
150	$\text{HOCl} + \text{Cl} \rightarrow \text{OH} + \text{Cl}_2$	$2.5\text{E-}12*\exp(-130/\text{T})$	
151	$\text{OCLO} + \text{OH} \rightarrow \text{HOCl} + \text{O}_2$	$4.5\text{E-}13*\exp(800/\text{T})$	
152	$\text{OCLO} + \text{Cl} \rightarrow \text{ClO} + \text{ClO}$	$3.4\text{E-}11*\exp(160/\text{T})$	

表 1.1-3 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学反応（異相反応を含む）（参考文献2）

No.	化学反応	反応速度係数 ^a	備考
153	$\text{OClO} + \text{O} \rightarrow \text{ClO} + \text{O}_2$	$2.4\text{E-}12 \cdot \exp(-960/\text{T})$	
154	$\text{OClO} + \text{NO} \rightarrow \text{ClO} + \text{NO}_2$	$2.51\text{E-}12 \cdot \exp(-600/\text{T})$	
155	$\text{ClONO}_2 + \text{O} \rightarrow \text{ClO} + \text{NO}_3$	$2.9\text{E-}11 \cdot \exp(-800/\text{T})$	
156	$\text{ClONO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{ClO} + \text{HNO}_3$	$1.2\text{E-}12 \cdot \exp(-330/\text{T})$	
157	$\text{CH}_3\text{Cl} + \text{OH} \rightarrow \text{ClO} + \text{CH}_2\text{O}$	$2.1\text{E-}12 \cdot \exp(-1150/\text{T})$	
158	$\text{CH}_3\text{CCl}_3 + \text{OH} \rightarrow 3 \text{Cl} + \text{Product}$	$1.8\text{E-}12 \cdot \exp(-1550/\text{T})$	
159	$\text{HO}_2\text{NO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2 + \text{NO}_2$	$1.3\text{E-}12 \cdot \exp(380/\text{T})$	
160	$\text{HBr} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{Br}$	$1.1\text{E-}11$	
161	$\text{BrO} + \text{O} \rightarrow \text{Br} + \text{O}_2$	$1.9\text{E-}11 \cdot \exp(230/\text{T})$	
162	$\text{Br} + \text{O}_3 \rightarrow \text{BrO} + \text{O}_2$	$1.7\text{E-}11 \cdot \exp(-800/\text{T})$	
163	$\text{BrO} + \text{NO} \rightarrow \text{Br} + \text{NO}_2$	$8.8\text{E-}12 \cdot \exp(260/\text{T})$	
164	$\text{Br} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{HBr} + \text{O}_2$	$1.5\text{E-}11 \cdot \exp(600/\text{T})$	
165	$\text{BrO} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{HOBr} + \text{O}_2$	$3.4\text{E-}11 \cdot \exp(540/\text{T})$	
166	$\text{Br} + \text{OClO} \rightarrow \text{BrO} + \text{ClO}$	$2.6\text{E-}11 \cdot \exp(-1300/\text{T})$	
167	$\text{BrO} + \text{ClO} \rightarrow \text{Br} + \text{OClO}$	$1.6\text{E-}12 \cdot \exp(430/\text{T})$	
168	$\text{BrO} + \text{ClO} \rightarrow \text{Br} + \text{Cl} + \text{O}_2$	$2.9\text{E-}12 \cdot \exp(220/\text{T})$	
169	$\text{BrO} + \text{ClO} \rightarrow \text{BrCl} + \text{O}_2$	$5.8\text{E-}13 \cdot \exp(170/\text{T})$	
170	$\text{BrO} + \text{BrO} \rightarrow \text{Br} + \text{Br} + \text{O}_2$	$1.5\text{E-}12 \cdot \exp(230/\text{T})$	
171	$\text{BrO} + \text{NO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{BrONO}_2 + \text{M}$	$k_0=5.2\text{E-}31 \cdot (300/\text{T})^{3.2}$ $k_\infty=6.9\text{E-}12$ $F=2.9$	b

硫酸エアロソル異相反応

172	$\text{N}_2\text{O}_5 + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow 2 \cdot \text{HNO}_3$	$5200 \cdot \text{SA} \cdot 0.1$	d
173	$\text{ClONO}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow \text{HOCl} + \text{HNO}_3$	$5200 \cdot \text{SA} \cdot 0.006$	d

PSC 異相反応

175	$\text{N}_2\text{O}_5(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{HNO}_3(\text{s}) + \text{HNO}_3(\text{s})$	$5200 \cdot \text{SA} \cdot 3.0\text{E-}4$	d
176	$\text{ClONO}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{HOCl}(\text{g}) + \text{HNO}_3(\text{s})$	$5200 \cdot \text{SA} \cdot 0.001$	d
177	$\text{N}_2\text{O}_5(\text{g}) + \text{HCl}(\text{s}) \rightarrow \text{ClNO}_2(\text{g}) + \text{HNO}_3(\text{s})$	$5200 \cdot \text{SA} \cdot 0.003$	d
178	$\text{ClONO}_2(\text{g}) + \text{HCl}(\text{s}) \rightarrow \text{Cl}_2(\text{g}) + \text{HNO}_3(\text{s})$	$5200 \cdot \text{SA} \cdot 0.1$	d
179	$\text{HOCl}(\text{g}) + \text{HCl}(\text{s}) \rightarrow \text{Cl}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{s})$	$5200 \cdot \text{SA} \cdot 0.1$	d

(注)

- ① $6.0\text{E-}34$ 等は 6.0×10^{-34} 等を意味する。Tは気温(K)、[M]は大気の数密度(分子 $\cdot\text{cm}^{-3}$)、 P_{atm} は気圧(atm)、 $[\text{H}_2\text{O}]$ は水蒸気の数密度(分子 $\cdot\text{cm}^{-3}$)。

② 表中の a, b, c, d の補足。

a. 反応速度係数の単位は、1 体反応の場合 s^{-1} 、2 体反応の場合 $cm^3 \cdot 分子^{-1} \cdot s^{-1}$ 、3 体反応の場合 $cm^6 \cdot 分子^{-2} \cdot s^{-1}$ 。

$$b. k = \frac{k_0 [M]}{1 + k_0 [M] / k_\infty} F^{\{1 + [\log_{10}(k_0 [M] / k_\infty)]^2\}^{-1}}$$

c. 分解反応の反応速度係数 k は、対応する生成反応の反応速度係数 (k_f とする) と平衡定数 K_{eq} より、次式を用いて求められる。 $k = k_f / K_{eq}$

例えば N_2O_5 の分解反応



の反応速度係数 k を求めるには、それと逆向きの反応 (N_2O_5 の生成反応) である



の反応速度係数 k_f を

$$k_0 = 2.00E-30 * (300/T)^{4.4}$$

$$k_\infty = 1.40E-12 * (300/T)^{0.7}$$

$$F = 0.60$$

$$k_f = \frac{k_0 [M]}{1 + k_0 [M] / k_\infty} F^{\{1 + [\log_{10}(k_0 [M] / k_\infty)]^2\}^{-1}}$$

によって求め、これと表中の平衡定数

$$K_{eq} = 3.00E-27 * \exp(10991/T)$$

を

$$k = k_f / K_{eq}$$

に代入すればよい。

d. SA はエアロソルの表面積密度 ($cm^2 \cdot cm^{-3}$)。

表 1.1-4 3次元化学輸送モデルが取り扱う光解離

1	$O_2 + h\nu \rightarrow 2^*O$
2	$O_3 + h\nu \rightarrow O(^1D) + O_2$
3	$O_3 + h\nu \rightarrow O + O_2$
4	$N_2O + h\nu \rightarrow O(^1D) + N_2$
5	$NO + h\nu \rightarrow N + O$
6	$NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O$
7	$N_2O_5 + h\nu \rightarrow NO_2 + NO_3$
8	$HNO_3 + h\nu \rightarrow NO_2 + OH$
9	$NO_3 + h\nu \rightarrow .89^*NO_2 + .11^*NO + .89^*O_3$
10	$HO_2NO_2 + h\nu \rightarrow NO_2 + HO_2$
11	$CH_4 + h\nu \rightarrow CH_3 + H$
12	$CH_3OOH + h\nu \rightarrow CH_2O + HO_2 + OH$
13	$CH_2O + h\nu \rightarrow CHO + H$
14	$CH_2O + h\nu \rightarrow CO + H_2$
15	$CO_2 + h\nu \rightarrow CO + O$
16	$H_2O + h\nu \rightarrow OH + H$
17	$H_2O_2 + h\nu \rightarrow 2^*OH$
18	$HO_2 + h\nu \rightarrow OH + O$
19	$CH_3CHO + h\nu \rightarrow CH_3O_2 + CO + HO_2$
20	$POOH(C_3H_6OHOOH) + h\nu \rightarrow CH_3CHO + CH_2O + HO_2 + OH$
21	$CH_3COOOH + h\nu \rightarrow CH_3O_2 + OH + CO_2$
22	$PAN(CH_3CO_3NO_2) + h\nu \rightarrow .6^*CH_3CO_3 + .6^*NO_2 + .4^*CH_3O_2 + .4^*NO_3$
23	$MPAN(CH_2CCH_3CO_3NO_2) + h\nu \rightarrow MCO_3(CH_2CCH_3CO_3) + NO_2$
24	$MACR(CH_2CCH_3CHO) + h\nu \rightarrow .67^*HO_2 + .33^*MCO_3(CH_2CCH_3CO_3) + .67^*CH_2O + .67^*CH_3CO_3 + .33^*OH + .67^*CO$
25	$MVK(CH_2CHCOCH_3) + h\nu \rightarrow .7^*C_3H_6 + .7^*CO + .3^*CH_3O_2 + .3^*CH_3CO_3$
26	$C_2H_5OOH + h\nu \rightarrow CH_3CHO + HO_2 + OH$
27	$C_3H_7OOH + h\nu \rightarrow 0.82^*CH_3COCH_3 + OH + HO_2$
28	$ROOH(CH_3COCH_2OOH) + h\nu \rightarrow CH_3CO_3 + CH_2O + OH$
29	$CH_3COCH_3 + h\nu \rightarrow CH_3CO_3 + CH_3O_2$
30	$CH_3COCHO + h\nu \rightarrow CH_3CO_3 + CO + HO_2$
31	$XOOH(HOCH_2COOHCH_3CHCHOH) + h\nu \rightarrow OH$
32	$ONITR(CH_2CCH_3CHONO_2CH_2OH) + h\nu \rightarrow HO_2 + CO + NO_2 + CH_2O$

表 1.1-4 3次元化学輸送モデルが取り扱う光解離

33	$\text{ISOPOOH}(\text{HOCH}_2\text{COOHCH}_3\text{CHCH}_2) + h\nu \rightarrow .402*\text{MVK}(\text{CH}_2\text{CHCOCH}_3) + .288*\text{MACR}(\text{CH}_2\text{CCH}_3\text{CHO}) + .69*\text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$
34	$\text{HYAC}(\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{OH}) + h\nu \rightarrow \text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{HO}_2 + \text{CH}_2\text{O}$
35	$\text{GLYALD}(\text{HOCH}_2\text{CHO}) + h\nu \rightarrow 2*\text{HO}_2 + \text{CO} + \text{CH}_2\text{O}$
36	$\text{HCl} + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{H}$
37	$\text{HOCl} + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{OH}$
38	$\text{ClONO}_2 + h\nu \rightarrow \text{ClO} + \text{NO}_2$
39	$\text{ClNO}_2 + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{NO}_2$
40	$\text{OCIO} + h\nu \rightarrow \text{ClO} + \text{O}$
41	$\text{Cl}_2\text{O}_2 + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{Cl} + \text{O}_2$
42	$\text{Cl}_2 + h\nu \rightarrow \text{Cl} + \text{Cl}$
43	$\text{CH}_3\text{Cl} + h\nu \rightarrow \text{CH}_3 + \text{Cl}$
44	$\text{CCl}_4 + h\nu \rightarrow 4 \text{Cl} + \text{Product}$
45	$\text{CFCl}_3 + h\nu \rightarrow 3 \text{Cl} + \text{Product}$
46	$\text{CF}_2\text{Cl}_2 + h\nu \rightarrow 2 \text{Cl} + \text{Product}$
47	$\text{CH}_3\text{CCl}_3 + h\nu \rightarrow 3 \text{Cl} + \text{Product}$
48	$\text{HO}_2\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{HO}_2 + \text{NO}_2$
49	$\text{BrONO}_2 + h\nu \rightarrow \text{BrO} + \text{NO}_2$
50	$\text{BrCl} + h\nu \rightarrow \text{Br} + \text{Cl}$
51	$\text{HOBr} + h\nu \rightarrow \text{Br} + \text{OH}$

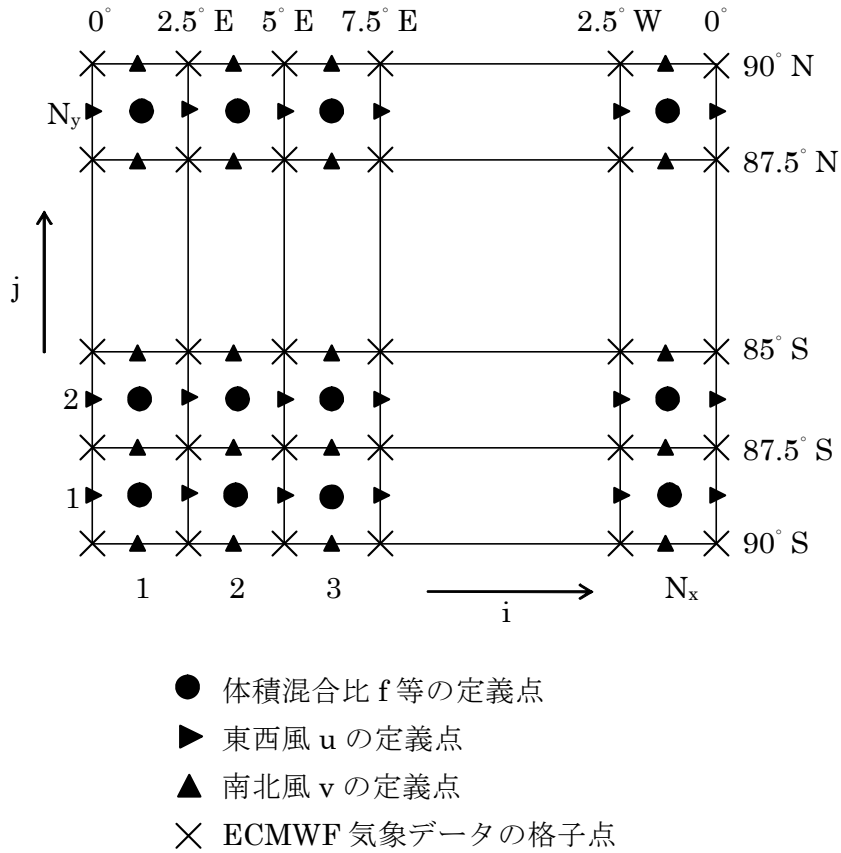


図 1.1-1 スタガード格子における体積混合比の定義点

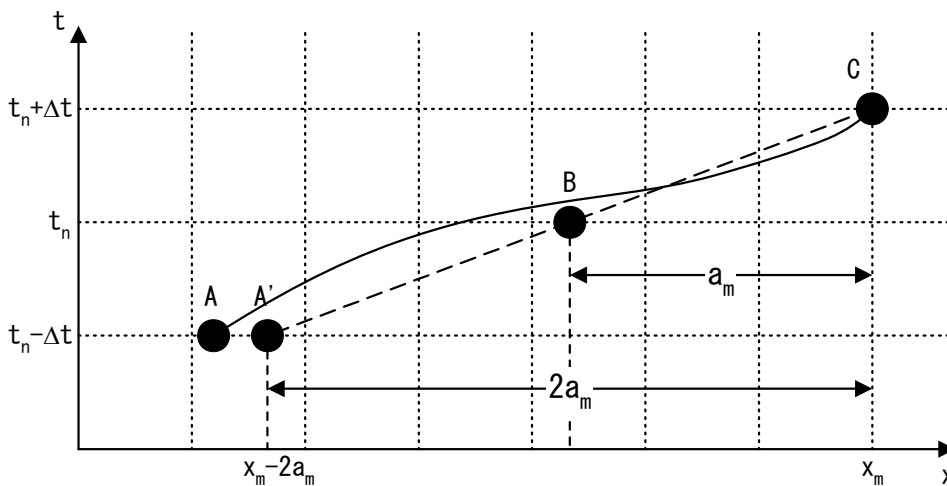


図 1.1-2 1次元の場合のセミラグランジュ法

時刻 $t_n + \Delta t$ に C にたどり着く流体粒子が実線の経路をたどるとき、これを破線で近似し、 a_m を反復法により求める。

1.2 作業内容

(1) キュービックラグランジュ (CUL) 法

① セミラグランジュ法

図 1.2-1 のように x 方向に速度 u で移流する一次元のプロファイル F について考える。

X 軸上での点 x_i での次のタイムステップ (Δt 秒後) の値を求める場合に、 x_i から風上方向に $u\Delta t$ だけさかのぼった点 (移流原点) の値がそのまま移流してくるという考えがセミ・ラグランジュ法の考え方である。つまり、

$$F(x_i, t+\Delta t) = F(x_i - u\Delta t, t) \quad (1.2-1)$$

が成立する。簡単にするため、移流速度が一定であると仮定すると、移流項は解析的に解くことが可能になり、式(1.2-1)は

$$F(x_i, t+\Delta t) = F(x_i - u\Delta t, 0) \quad (1.2-2)$$

と書くことができる。速度が時間や空間に依存している場合でも、 Δt が非常に小さいという仮定のもとで、式(1.2-1)は成立する。つまり、計算対象点 x_i での Δt 秒後の値 $F(x_i, t+\Delta t)$ を求めるためには、今の時刻での移流原点における値 $F(x_i - u\Delta t, t)$ を求めればよいということになる。

② CUL 法

CUL 法は、従属変数として物理量のみを持ち、計算格子点を 4 点用いて 3 次のラグランジュ補間を形成する、セミ・ラグランジュ法の一つである (図 1.2-2)。計算に用いる 4 点は、計算点と風上の 2 点、風下の 1 点である。

図 1.2-2 のように移流速度が正の場合、計算点での物理量の値 f_i および風上の 2 点 f_{i-1} , f_{i-2} と風下の 1 点 f_{i+1} から、以下のような 3 次補間関数を、 f_i を基準に形成する。

$$F(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d \quad (1.2-3)$$

この補間関数に、適合条件

$$F(\Delta x) = f_{i+1}$$

$$F(0) = f_i$$

$$F(-\Delta x) = f_{i-1}$$

$$F(-2\Delta x) = f_{i-2}$$

を代入して解くと、

$$a = (f_{i+1} - 3f_i + 3f_{i-1} - f_{i-2})/6\Delta x^3 \quad (1.2-4)$$

$$b = (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})/2\Delta x^2 \quad (1.2-5)$$

$$c = (2f_{i+1} + 3f_i - 6f_{i-1} + f_{i-2})/6\Delta x \quad (1.2-6)$$

$$d = f_i \quad (1.2-7)$$

のように係数が決まる。この補間関数から移流原点を求めることで、次のタイムステッ

プでの値を求めることができる。移流原点の値は、式(1.2-3)と $\xi = u\Delta t$ を用いることで、

$$F(x_i, t+\Delta t) = a\xi^3 + b\xi^2 + c\xi + d \quad (1.2-8)$$

と求めることができる。

移流速度が負の場合には、計算点での物理量の値 f_i に、風上の 2 点 f_{i+1} , f_{i+2} と風下の 1 点 f_{i-1} から 3 次補間関数を形成する。補間関数(1.2-3)に、適合条件

$$F(2\Delta x) = f_{i+2}$$

$$F(\Delta x) = f_{i+1}$$

$$F(0) = f_i$$

$$F(-\Delta x) = f_{i-1}$$

を代入して解くと、

$$a = (f_{i+2} - 3f_{i+1} + 3f_i - f_{i-1})/6\Delta x^3 \quad (1.2-9)$$

$$b = (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})/2\Delta x^2 \quad (1.2-10)$$

$$c = -(2f_{i-1} + 3f_i - 6f_{i+1} + f_{i+2})/6\Delta x \quad (1.2-11)$$

$$d = f_i \quad (1.2-12)$$

となる。

次に、多次元 CUL 法について考える。多次元問題に対しては、1 次元 CUL 法を多数回適用することで移流原点を求める。方法はいくつかあるが、ここでは x 方向→ y 方向→ z 方向の順序で補間を行う場合を考える。このとき CUL 法では物理量のみを用いるので、最終的には z 方向に 4 点が必要となる。そのためには、 y 方向で 4 回の 1 次元 CUL 法を行う必要があり、さらにそのためには 16 点が必要となる。そこでまず、16 回の 1 次元 CUL 法を行い、そこで求めた 16 点を用いて y 方向に 4 回補間する。最後に y 方向の補間により求めた 4 点を用いて z 方向に 1 回補間を行い、移流原点を求めることになる。

さらに、方向分離の補間方法を行うことを考える。方向分離とは、 x 方向→ y 方向→ z 方向と一度に行っている補間を、まず x 方向→ y 方向の補間を全点に対して行い、最後に z 方向の補間を行う方法である。

図 1.2-3 に示されているように、水平方向での移流原点を求めるため、16 点を用い x 方向に 4 回の 1 次元補間を行い、そこで求めた赤で記された 4 点を用いて y 方向に 1 回補間を行う。これで $F(i, j, k)$ に対する移流原点 $F^*(i, j, k)$ が求まり、計算領域全点に対し $F^*(i, j, k)$ を求める。その後求めた $F^*(i, j, k)$ を用いて再び全点に対して z 方向への補間を行う。これにより、これまで 21 回行っていた補間回数を、方向分離により 6 回に減らすことが可能となる。本モデルでは、水平方向の格子間隔が鉛直方向の格子間隔に比

べて非常に大きいため、方向分離の方法を用いても問題にならない。

(2) CUL 法の導入実験

CUL 法の導入にあたり、予備的な実験を行った。初期状態において、直交座標平面上に円錐状の濃度分布を置き（図 1.2-4 参照）、x 軸方向に一様な風が吹いた場合の濃度変化の計算を、CUL 法と風上差分法の 2 通りの方法で行った。計算結果を図 1.2-5(a)に示す。

- 風上差分法では、数値拡散が発生し、濃度のピークが時間とともに低くなるのに対し、CUL 法ではピークの低下が小さい。
- CUL 法では、周囲に波状の構造が発生する。但し、この波の振幅が成長することはない。

このような波が発生すると、図 1.2-5(a)左図の白色の部分のように計算値が負になることがある。これを 0 もしくは微小な正の値で置き換えることで補正すれば、質量保存則が成り立たなくなってしまうので、できる限りその振幅が小さくなることが望ましい。

そこで、CUL 法に、 10^{-4}s^{-1} 程度の人工的な数値粘性を付加することで、上記のような波の発生を抑えることを試みた。

単純な CUL 法と数値粘性付き CUL 法の 2 通りの方法で行った結果を比較したものが図 1.2-5(b)及び図 1.2-6 である。

- 数値粘性を加えることにより濃度値が負になる部分が大幅に減少した。負の濃度値を 0 で置き換えても、質量保存則からのずれは小さく抑えられる。
- 数値粘性によるピーク値の低下は見られるが、風上差分法によるそれに比べ小幅に抑えることができる。

この結果より、3次元化学輸送モデルの輸送スキームとして数値粘性付き CUL 法を導入することとした。

(3) CUL 法の実装

気象データを読み込んで、風による物質の移動と光化学反応を模擬し、化学種の分布を算出する 3次元化学輸送モデルを作成した。

CUL 法導入に際しては、広域的なプログラムの書き換えによるバグの混入を防ぐため、輸送過程計算ルーチン `dynam` 以下を置き換える形で導入した。

また、極付近で計算格子が密集することにより Δx が小さくなり、 Δt だけ前の時刻の位置が隣接する格子よりもさらに離れてしまうと、CUL 法における補間の精度が悪くなるため、移流計算の際には Δt を N 分の 1 にした計算を N 回繰り返す、その後光化学反応による生成・消滅の計算を行うようにした（本報告に示した実験例では、 $N=20$ ）。

さらに、各化学種の体積混合比が局所的に小さくなってしまい、化学反応を通じて他の化学種に伝播することを防ぐため、 10^{-20} より小さい濃度になった場合は 10^{-20} に置き直すようにした。

(4) 実行性能向上のための改良

次に、3次元化学輸送モデルを現実的な速度で実行させるため、並列計算機に対応できるようモデルの改良作業を行った。改良は、do ループの見直しと並列計算機での実行を可能とする2点である。

do ループの見直しとして、プログラムのプロファイリングをすることにより、ボトルネックになっているルーチンを抽出し、そのルーチンに対して、ループ処理の順番を入れ替える処理を施した(setpdj.f)。

並列計算機への対応では、オリジナルのプログラムをできるだけ活かすため、また活かさないことによる広域的なプログラムの変更に対してのバグの混入を防ぎながらも並列化への対応を可能とするために、並列化の適用は、CUL 法に係わるルーチン dynam で定義された配列に対して行った。

並列化の方法として、複数の CPU がメモリを共有して処理を並行実行させる共有メモリ型並列計算機である HP 社製 DL380 を使用し、OpenMP による並列化チューニングを行った。実行速度の大きな向上と大きな並列度への対応を念頭におくと、分散メモリ型に即した並列化が望ましい。しかし、プログラムの入出力ファイルの制御など、本モデルを利用するユーザへの影響も大きい(例えば、領域分割法で実装された分散メモリ型並列プログラムを実行すると、各領域毎にバラバラのファイルが出力されるのが普通であり、今までの逐次実行型のプログラムからの出力ファイルと同じように計算結果を確認するためには、ユーザになんらかの負担を強いる)。また、既存プログラムのデータ構造を慎重に検討した上で、大域的に変更する必要があるが、非常に多くの工数がかかる。これに対して、共有メモリ型並列計算は、多数の CPU による並列計算には向いていないが、分散メモリ型並列計算に比べソースコードの変更が少なく、メモリの配分などの考慮をしなくてもすむし、ユーザも並列化されていることをほとんど意識する必要がない。必要に応じて、加速化したいルーチンだけを並列化することも可能である。よって、今回は並列化による加速効果を見極めるための試作品として共有メモリ型を選択した。

(5) 計算時間

本スタディで実施した 1994 年 3 月～1995 年 12 月までの 22 ヶ月間の実験では、改良後のプログラムの計算時間は、次のようになった。

% time	cumulative seconds	self seconds	self calls	routine name
27.92	175876.07	175876.07	21885120	hculs_
13.88	263302.49	87426.43	32184	setpdj_
10.41	328903.25	65600.75	32184	slvhox_
9.94	391531.84	62628.60	32184	setcrk_

8.21	443284.57	51752.72	21885120	vculs_
6.57	484660.39	41375.82	32184	slvnoy_
6.45	525301.83	40641.44	32184	slvox_
6.44	565887.17	40585.34	32184	slvcly_
2.26	580098.20	14211.03	1094256	dynam_
2.03	592859.62	12761.42	21885120	smoo2s_
1.41	601736.18	8876.56	32184	slvbry_

CUL 法の実行に占める割合は約 40 パーセントである。ここで完成した本プロトタイプでは、この部分を計算機の構成に合わせて並列実行することが可能である。

なお、本実験の総計算時間は 629961.35(seconds)=174.99(hours)つまり 7.3 日間である。これは、1 日分の計算に要する CPU 時間に直すと約 16 分となり、性能要件を十分に満たす結果となった。

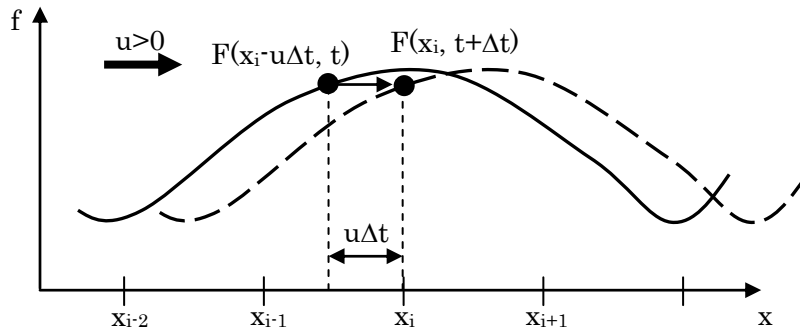


図 1.2-1 セミ・ラグランジュ法概念図

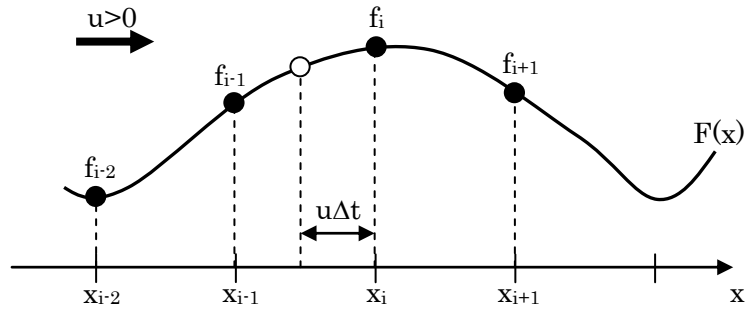


図 1.2-2 CUL 法概念図

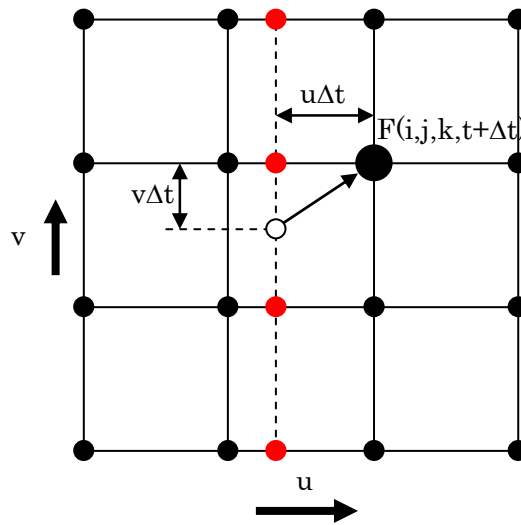


図 1.2-3 水平方向補間の概念図

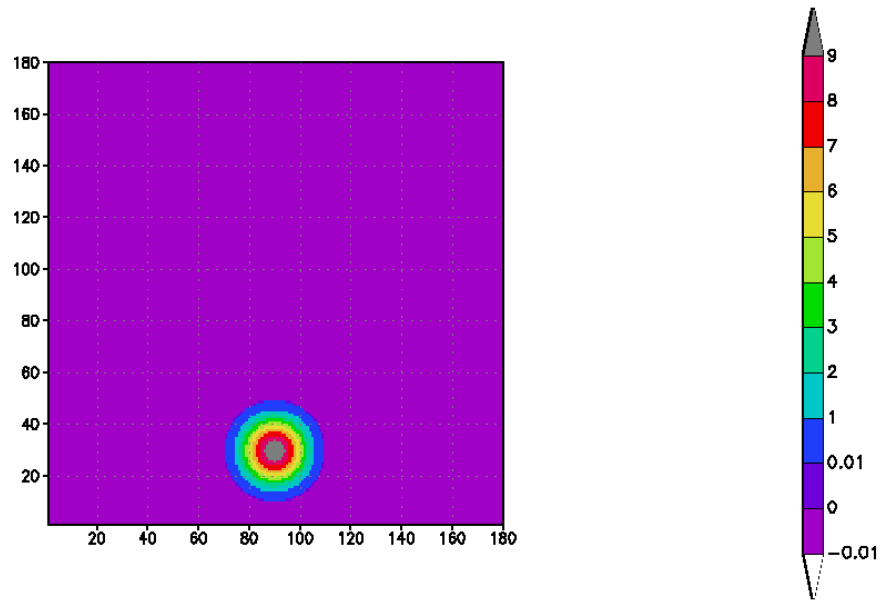
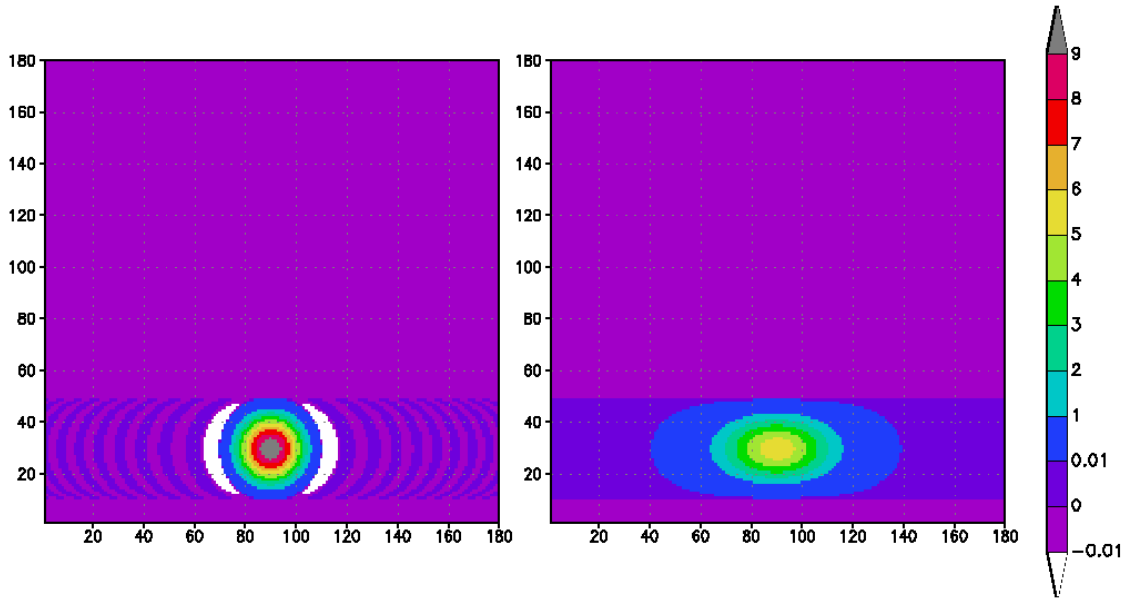


図 1.2-4 CUL 法の予備実験 (初期状態)

(a) 計算結果 (左: CUL 法、右: 風上差分法)



(b) 計算結果 (左: CUL 法、右: 数値粘性付き CUL 法)

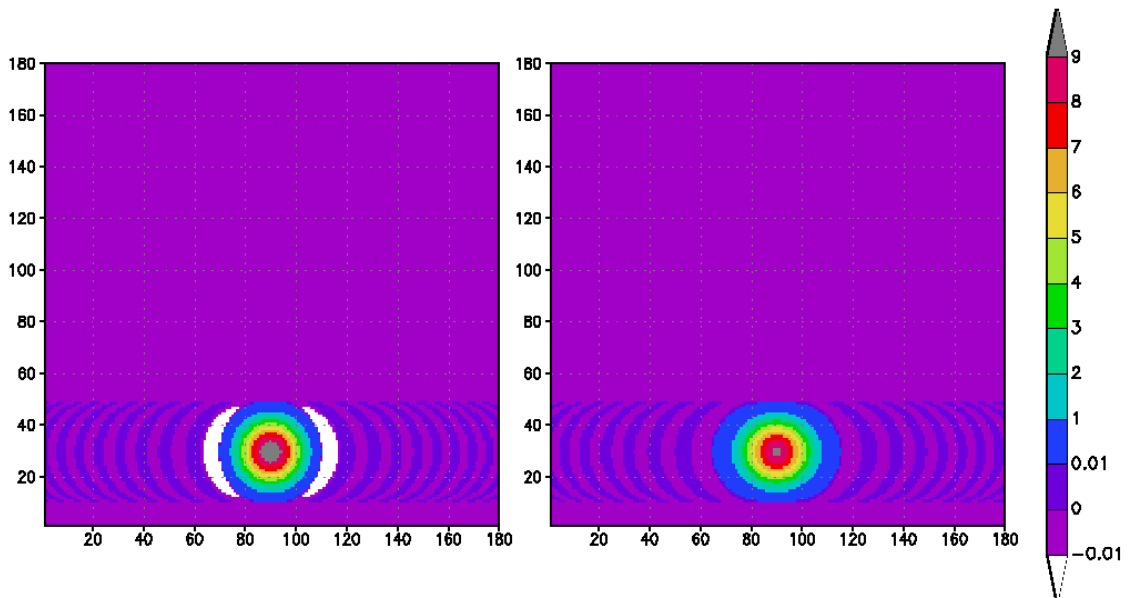


図 1.2-5 CUL 法の予備実験の結果

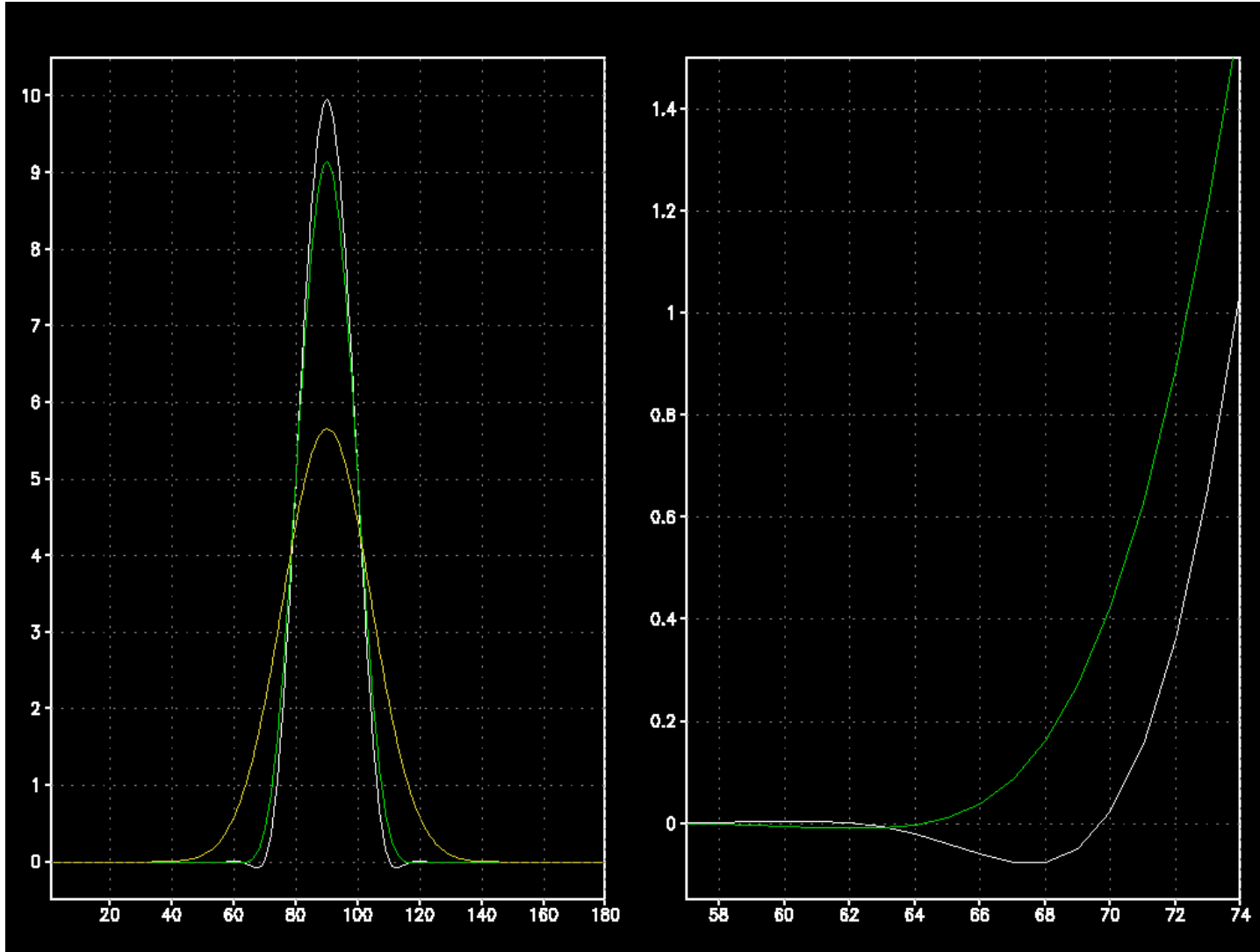


図 1.2-6 CUL 法の予備実験の詳細比較 (左: $y=30$ における断面、右: 拡大図)

黄色: 風上差分法、白: CUL 法、緑: 数値粘性付き CUL 法

1.3 気象データの収集・整理

3次元化学輸送モデルの入力として用いる気象データとして、欧州中期気象予報センター（ECMWF）が解析し発表している全球気象解析データ Basic Level III-A Global Atmospheric Data Archive（以下、ECMWF 全球気象解析データ）を使用した。

ECMWF 全球気象解析データの仕様は、以下のとおりである。

水平解像度：	2.5° 格子（格子数 144×73）
鉛直解像度：	地上+15層（1000, 925, 850, 700, 500, 400, 300, 250, 200, 150, 100, 70, 50, 30, 10hPa）
気象要素：	ジオポテンシャル高度、気温、風速（東西成分、南北成分、鉛直成分）、相対湿度
時間間隔：	12時間ごと（世界標準時 00時、12時）
データ量：	1時刻あたり約 2.1Mbyte
データの期間：	1994年1月1日～1994年12月31日

ECMWF 全球気象解析データ及びそのソフトウェアの利用にあたっては、以下の利用条件がある。

1. 本ソフトウェアの所有権及び著作権は ECMWF が保有する。本ソフトウェアは ECMWF データの利用目的に限り提供されるものであり、他の目的のために利用してはならない。
2. ECMWF の許可なく、提供されたデータならびにソフトウェアの全部あるいは一部を、第三者に提供してはならない。
3. データおよびソフトウェアを商用目的で利用してはならない。
4. ECMWF の提供したデータの全部あるいは一部に基づいた記事、論文、ならびに科学研究の成果を公表する場合は、ECMWF 提供データである旨を次の例のように明示しなければならない：“ECMWF 1996. The Description of the ECMWF/WCRP Level III-A Global Atmospheric Data Archive”
5. データならびにソフトウェアの準備およびテストには万全を期しているが、どのような状況の下でもデータが正しいこと、あるいはどのような状況でもソフトウェアが正しく動作することを ECMWF が保証するものではない。本データおよびソフトウェアの誤りないし欠損、ならびにその利用に基づくいかなる損害や損失に関しても、ECMWF はその責を負わない。
6. 本データおよびソフトウェアの利用は、データの提供を受けた組織の科学者が同一のコンピュータにインストールする場合に限る。
7. 本データおよびソフトウェアの提供を受けたものは、すべてのデータ利用者に対

し、この利用条件を知らせる責任がある。

データは 18 トラックの IBM3480 カートリッジテープにラベルなし (NL)、ブロック長 10560 バイトで記録されている。但し、レコード長を示すワード等は含まれていないので、直接 (Direct) アクセスで読み込んだ。1 つの論理レコード (21108 バイト) は 2 つのテープブロックから構成されている。

オリジナルのデータファイルでは 1 ヶ月分のデータを 1 ファイルに収容していたが、そのままでは扱いにくいので 1 時刻 1 ファイルに分割した (フォーマットは変更していない)。

1 時刻分のファイルは 99 のレコード (2,089,692 バイト) からなり、1 つのレコードには、1 つの気圧面、1 つの気象要素のデータが全球分格納されている。

1 つの論理レコード (21108 バイト) は、WMO が世界の気象機関間のデータ交換のために定めた書式 FM-92 GRIB (GRIdded Binary) に従って構成されている。GRIB は各種のデータを表現することができるようさまざまなパラメータが指定できるようになっている。ECMWF 気象解析データの場合、次の 5 つのセクションから構成されている (セクション 3 (ビットマップセクション) は存在しない)。

- セクション 0 (8 バイト) : 表示セクション
- セクション 1 (28 バイト) : 製品定義セクション
- セクション 2 (32 バイト) : 格子記述セクション
- セクション 4 (21036 バイト) : バイナリデータセクション
- セクション 5 (4 バイト) : 終端セクション

各部分の内容は表 1.3-1 のとおり。

ECMWF 全球気象解析データは圧縮されて保存されているので、読み出す際には復元する必要がある。そのためには、セクション 1 の 10 進スケール値 D、セクション 4 の 2 進スケール値 E、基準値 R、及び各格子点の値 $X(i,j)$ ($1 \leq i \leq 144$, $1 \leq j \leq 73$) を用いると、元のデータ $Q(i,j)$ は、

$$Q(i,j) = (R + X(i,j) \times 2^E) \times 10^{-D} \quad (1.3-1)$$

によって得ることができる。なお、基準値 R は IBM 浮動小数点表現となっているため、プログラム内で変換する必要がある。

以上のデータの読み出し・変換等については、ECMWF から送付されてきたテープに FORTRAN (一部は C) のプログラム GRIBEX が付属していたので、これを利用した。

ECMWF 気象解析データのグリッドは、第 1 添字が経度 (東向き)、第 2 添字が緯度 (南向き) を表わす。データ点は (1,1) から順に東回りに並び、(144,1) は (1,1) の西隣となっており、2 列目はその南隣の列になる。また 1 列目のデータはすべて北極点の値、73 列目のデ

ータはすべて南極点の値である（スカラー値は同じ値が入っている。ベクトル値については各子午線を基準軸に取った値に変換されている）。

上記の方法で読み取った ECMWF 気象解析データのサンプルを図 1.3-1～図 1.3-7 に示す。

表 1.3-1 ECMWF 全球気象解析データのレコードフォーマット

記録：書式なし（バイナリ）

論理レコードの形式：固定長

論理レコード長：21108 バイト/レコード

セクション 0（8 バイト）

バイト	内容 [単位]	値	GRIBEX 引数
1-4	開始文字列（ASCII コード）	"GRIB"	
5-7	GRIB レコードの長さ [バイト]	21108	ksec0(1)
8	GRIB の版数	1	ksec0(2)

セクション 1（28 バイト）

バイト	内容 [単位]	値	GRIBEX 引数
1-3	セクション 1 の長さ [バイト]	28	
4	気象要素表 (WMO マニュアル表 2) のバージョン	128	ksec1(1)
5	作成したセンターの ID	98 (ECMWF)	ksec1(2)
6	作成したプログラムの ID	122	ksec1(3)
7	グリッド ID	255 (セクション 2 で記述)	ksec1(4)
8	セクション 2 及び 3 の有無	128 (セクション 2 のみ存在)	ksec1(5)
9	データの種類	129 : ジオポテンシャル [m ² ・s ⁻²] 130 : 気温 [K] 131 : 東西風 [m・s ⁻¹] 132 : 南北風 [m・s ⁻¹] 134 : 地表気圧 [Pa] 135 : 鉛直風速 [Pa・s ⁻¹] 139 : 地表面温度 [K] 151 : 海面気圧 [Pa] 157 : 相対湿度 [%] 165 : 地上 10m 東西風 [m・s ⁻¹]	ksec1(6)

バイト	内容 [単位]	値	GRIBEX 引数
		166: 地上 10m 南北風 [m・s ⁻¹] 167: 地上 2m 気温 [K] 168: 地上 2m 露点 [K] 172: 海陸マスク	
10	面の種類	1: 地表 100: 気圧面 [hPa] 112: 地中の層 [cm]	ksec1(7)
11-12	面の値		ksec1(8), ksec1(9)
13	年 (西暦の下 2 桁)		ksec1(10)
14	月		ksec1(11)
15	日		ksec1(12)
16	時		ksec1(13)
17	分		ksec1(14)
18	予報時間の単位	1	ksec1(15)
19	予報時間 1	0	ksec1(16)
20	予報時間 2	0	ksec1(17)
21	時間範囲フラグ	0 (非初期化)	ksec1(18)
22-23	平均・積算したデータの個数	0	ksec1(19)
24	平均・積算できなかった欠測データの個数	0	ksec1(20)
25	世紀	20	ksec1(21)
26	予約領域	0	ksec1(22)
27-28	10 進スケール値 D		ksec1(23)

セクション 2 (32 バイト)

バイト	内容 [単位]	値	GRIBEX 引数
1-3	セクション 2 の長さ [バイト]	32	
4	鉛直座標の個数	0	ksec2(12)
5	予約領域	127	
6	グリッドの種類	0 (緯度・経度格子)	ksec2(1)
7-8	緯度方向の格子点数	144	ksec2(2)
9-10	経度方向の格子点数	73	ksec2(3)

バイト	内容 [単位]	値	GRIBEX 引数
11-13	最初の格子点の緯度 [10^{-3}°]	90000	ksec2(4)
14-16	最初の格子点の経度 [10^{-3}°]	0	ksec2(5)
17	精度・成分フラグ	128	ksec2(6), ksec2(18), ksec2(19)
18-20	最後の格子点の緯度 [10^{-3}°]	-90000	ksec2(7)
21-23	最後の格子点の経度 [10^{-3}°]	357500	ksec2(8)
24-25	経度増分 [10^{-3}°]	2500	ksec2(9)
26-27	緯度増分 [10^{-3}°]	2500	ksec2(10)
28	スキャンモード	0	ksec2(11)
29-32	予約領域	0	

セクション 4 (21036 バイト)

バイト	内容 [単位]	値	GRIBEX 引数
1-3	セクション 4 の長さ [バイト]	21036	
4	データ並び・圧縮方法等のフラグ セクション 4 の最後の使われていないビット数	8	ksec4(3) ~ ksec4(6)
5-6	2 進スケール値 E		
7-10	基準値 R (IBM 浮動小数点表現)		
11	1 点あたりの圧縮データのビット数	16	ksec4(2)
12 - 21035	各格子点のデータ (各 2 バイト) ((X(i,j), i=1,144),j=1,73)		psec4(展開済 みの値)
21036	未使用領域		

セクション 5 (4 バイト)

バイト	内容 [単位]	値	GRIBEX 引数
1-4	終端文字列(ASCII コード)	"7777"	

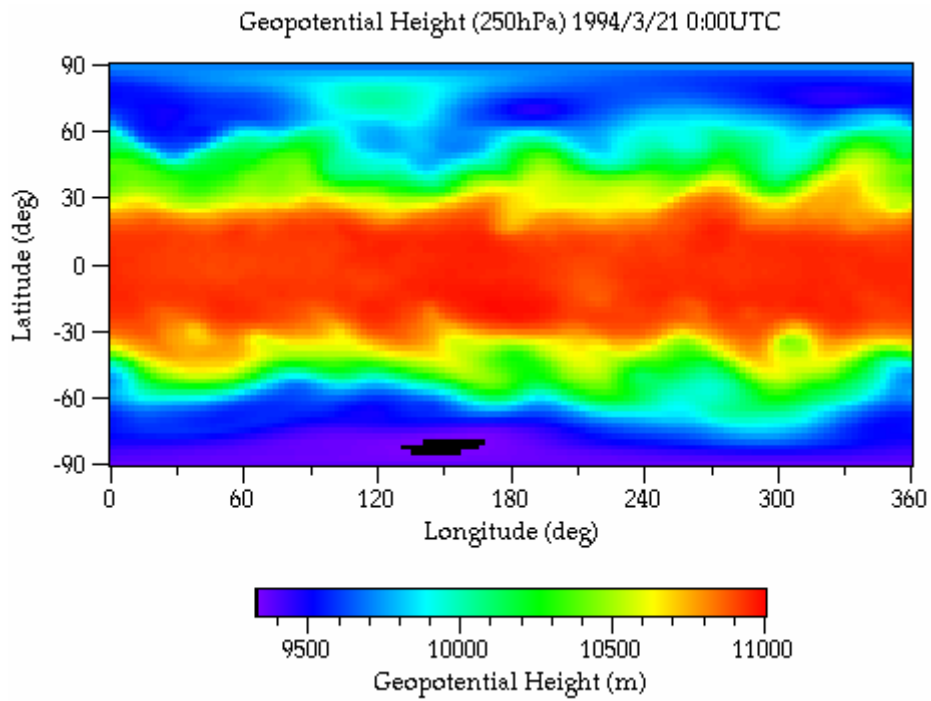


図 1.3-1 1994 年 3 月 21 日 0 時の 250hPa 面におけるジオポテンシャル高度 [単位 : m]

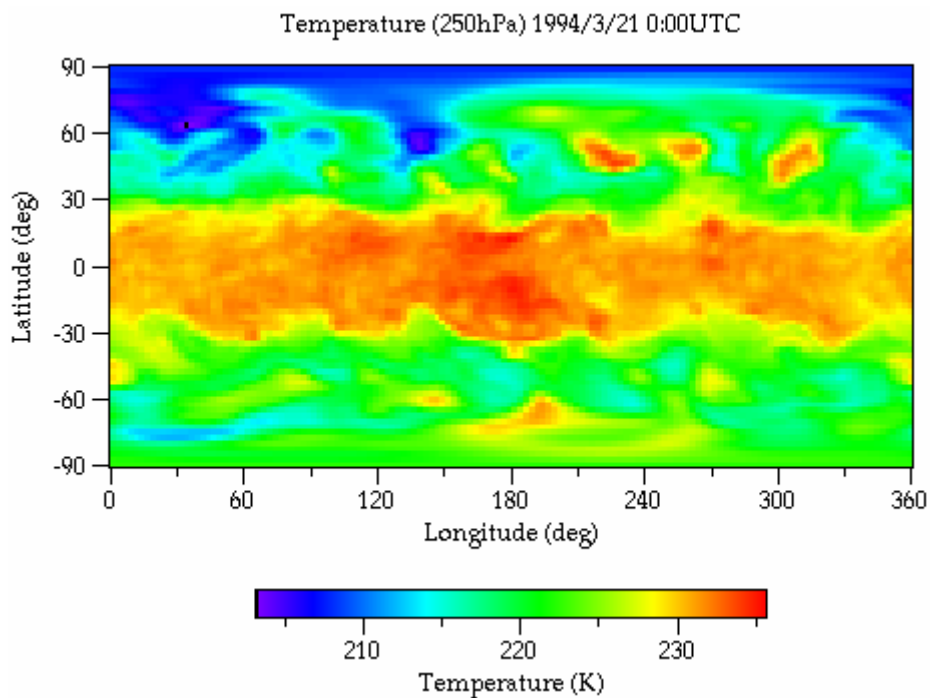


図 1.3-2 1994 年 3 月 21 日 0 時の 250hPa 面における気温 [単位 : K]

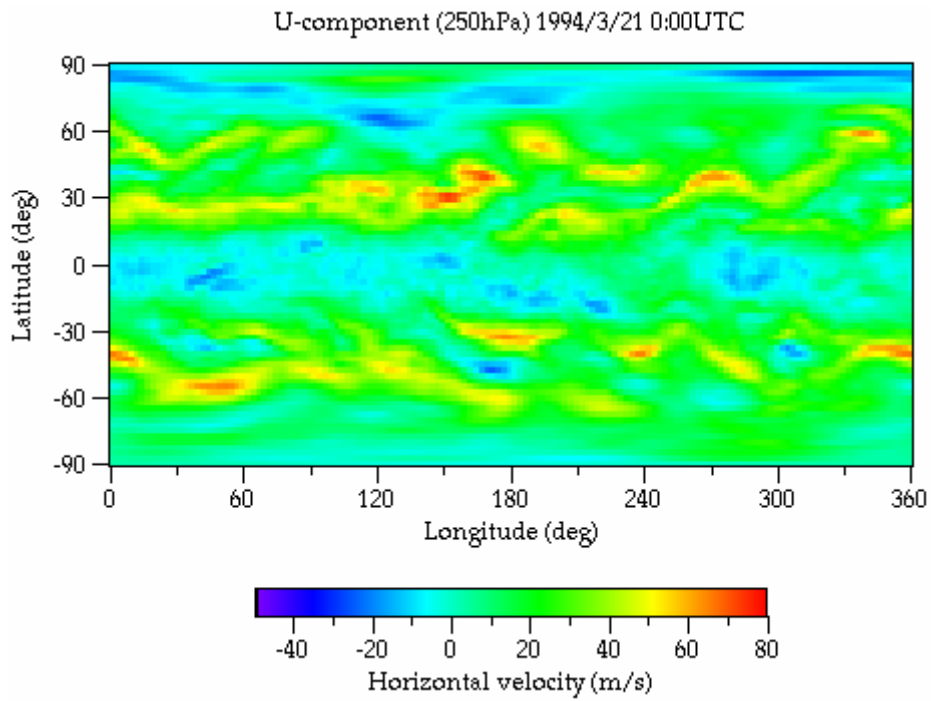


図 1.3-3 1994 年 3 月 21 日 0 時の 250hPa 面における東西風速 [単位 : $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]

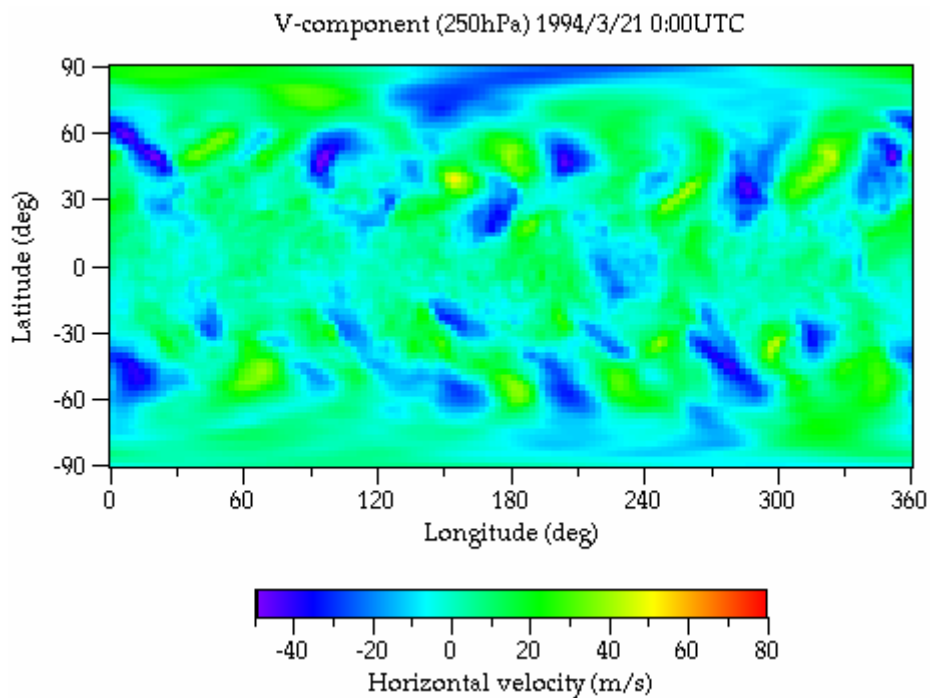


図 1.3-4 1994 年 3 月 21 日 0 時の 250hPa 面における南北風速 [単位 : $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]

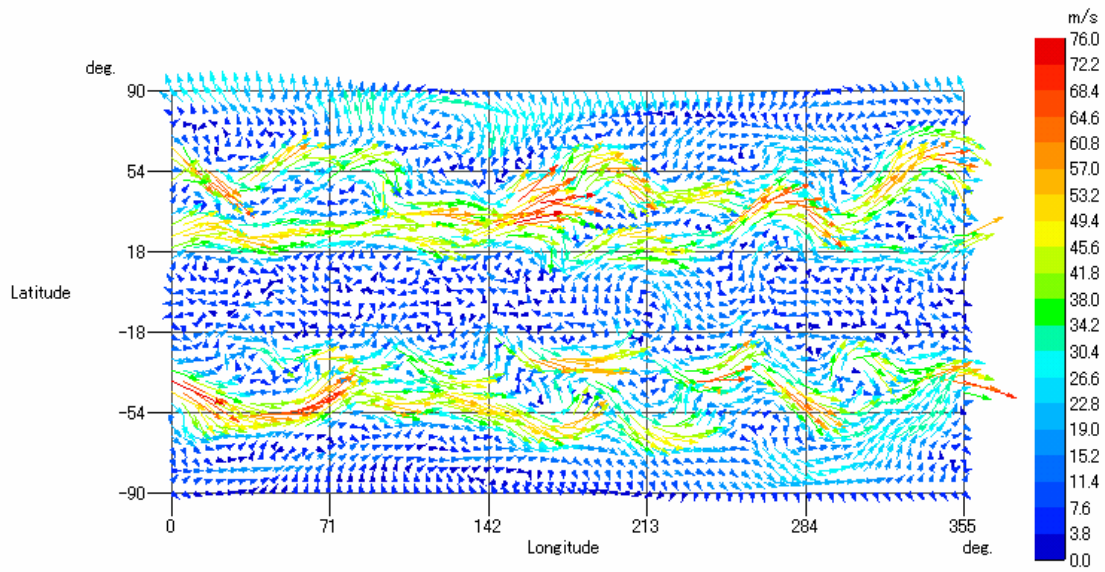


図 1.3-5 1994年3月21日0時の250hPa面における風速ベクトル [単位： $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]

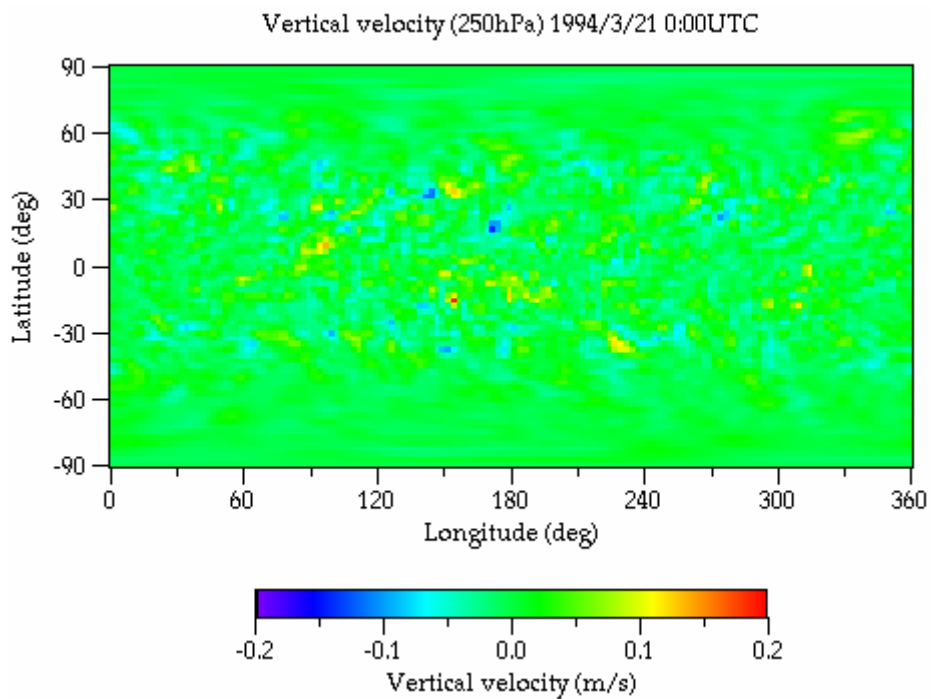


図 1.3-6 1994年3月21日0時の250hPa面における鉛直風速 [単位： $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]

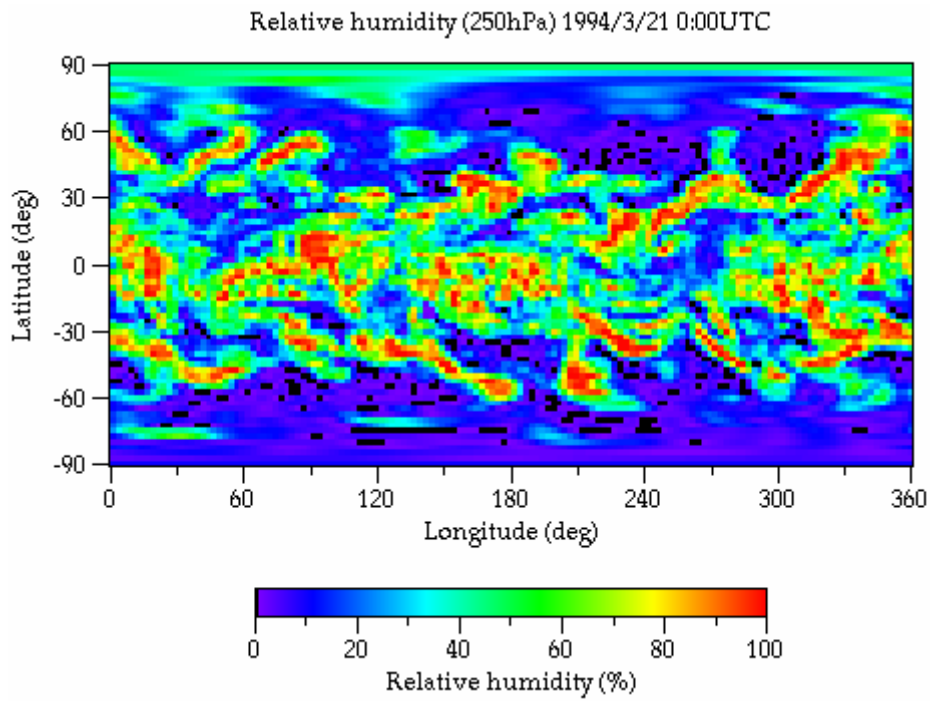


図 1.3-7 1994年3月21日0時の250hPa面における相対湿度 [単位：%]

1.4 モデルの検証

1999年にNASAが実施した「モデルと観測ワークショップⅡ」(Models and Measurements Workshop II、以下M&MワークショップⅡ)の報告書¹⁾と同等の条件で計算を行い、計算結果をNASAの同報告書にまとめられている観測値や他のモデルの計算値と比較し、どの程度一致するかを検証した。

計算条件は以下のとおり。

計算期間：1994年3月1日0時～1995年12月31日0時(世界標準時)

初期条件：東西方向に一様

計算結果を図1.4-1に示す。光解離による反応時定数の短い化学種では昼夜の差がはっきり見られ、反応時定数の長い化学種では風によって輸送される様子が見られるなど、自然な分布と矛盾しない結果となった。

本プロトタイプでは高度領域が10hPa面(約32km)までしかないため、オゾン体積混合比の子午面分布(高度30kmか少し上くらいにピークがある)やオゾン全量(鉛直積分量)で比較することはできない。

そこで、オゾン分圧の子午面分布および高度分布が再現できているかどうかを検証した。季節ごとのオゾン分圧の子午面分布を図1.4-2に示す。対流圏の赤道域にオゾン分圧が15nb以下となる少ない領域があること、オゾン分圧のピーク高度が、極域では100hPa面付近であるのに対し、低緯度領域では30～20hPa面付近であることなど、分圧値も含めてよく再現できている。

オゾン分圧の高度分布を図1.4-3～図1.4-8に示す。下部成層圏のオゾン分圧の最大値や、それ以上の高度でのオゾン分圧の値は、気候値と比べ若干低めであるがよく一致している。しかし、対流圏のオゾン分圧は過小評価となり、下端境界値(30ppbv)よりも少なくなってしまう。但し対流圏のオゾン濃度は他のモデルもばらつきが大きく、本プロトタイプの結果はその範囲内に入っているといえる。

オゾン以外の化学種について観測値との比較を行ったものが図1.4-9～図1.4-14(順にN₂O、CH₄、NO_x、HNO₃、NO_y、HCl)である。図1.4-9のN₂O体積混合比の子午面分布では、値は概ね合っているものの、低緯度における高濃度の再現性が十分でない。CH₄体積混合比の子午面分布についても同じことがいえる(図1.4-10参照)。これは赤道域で活発な積雲対流による上方への輸送が、本プロトタイプでは表現されていないことが原因と考えられる(表1.1-1参照)。

一方、他のモデルによる計算結果と比較したものを図1.4-15～図1.4-21に示す。HNO₃の体積混合比の子午面分布(図1.4-15および図1.4-16)では、25km付近の濃度ピークがあることは再現できているが、その値は他のモデルに比べて小さ過ぎ、対流圏の濃度は逆

に過大に評価されている。本プロトタイプでは、湿性沈着（雲水や雨水に溶けて大気中から除去されること）のプロセスが導入されていないため、対流圏における HNO_3 の濃度が過大評価されたものと考えられる。

(a) オゾンの体積混合比 (100hPa 面)

O3[ppmv], 100[hPa]

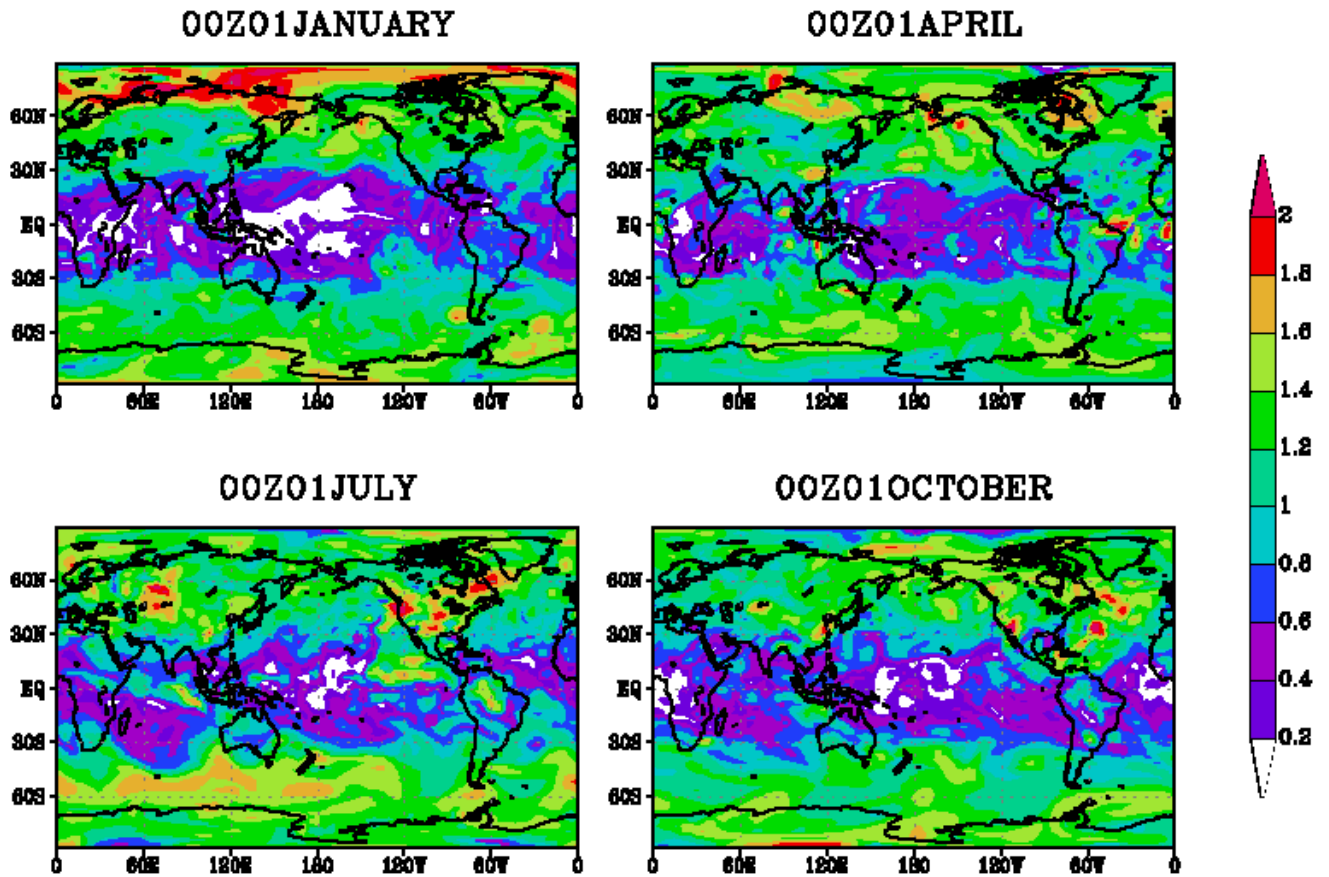


図 1.4-1 本モデルによる計算結果の例

(b) NO の体積混合比 (100hPa 面)

NO[ppbv], 100[hPa]

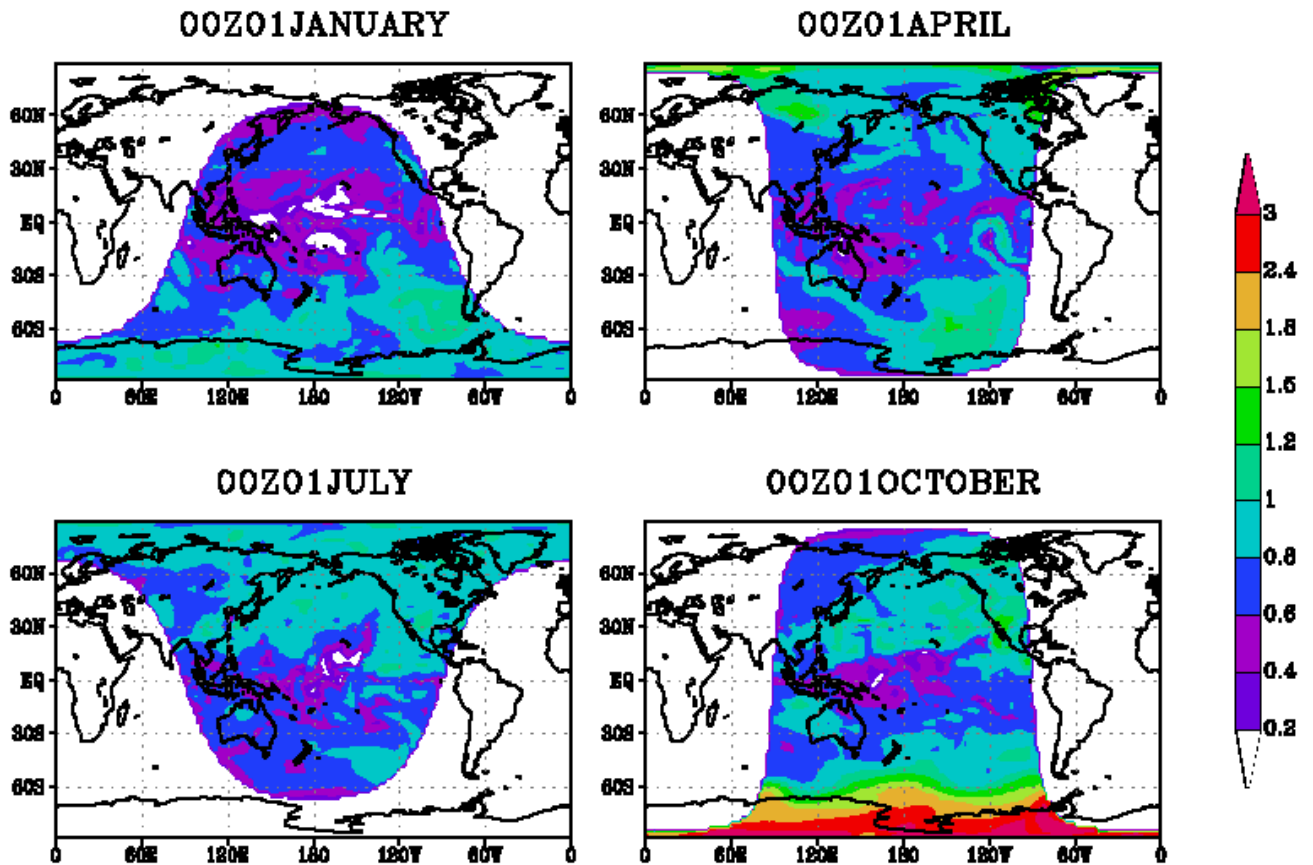


図 1.4-1 本モデルによる計算結果の例

(c) NO₂の体積混合比 (100hPa 面)

NO₂[ppbv], 100[hPa]

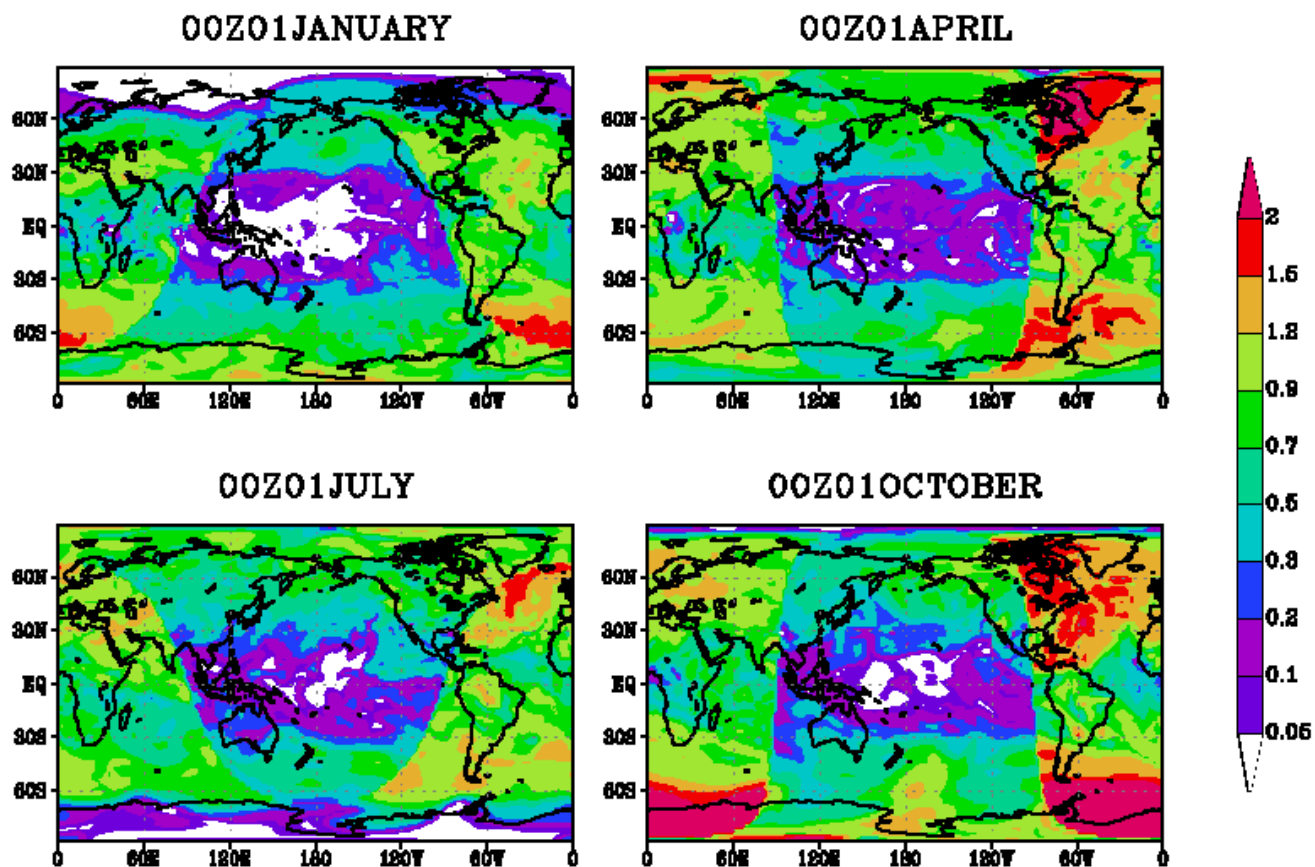


図 1.4-1 本モデルによる計算結果の例

(d) NO₃の体積混合比 (100hPa 面)

N03[pptv], 100[hPa]

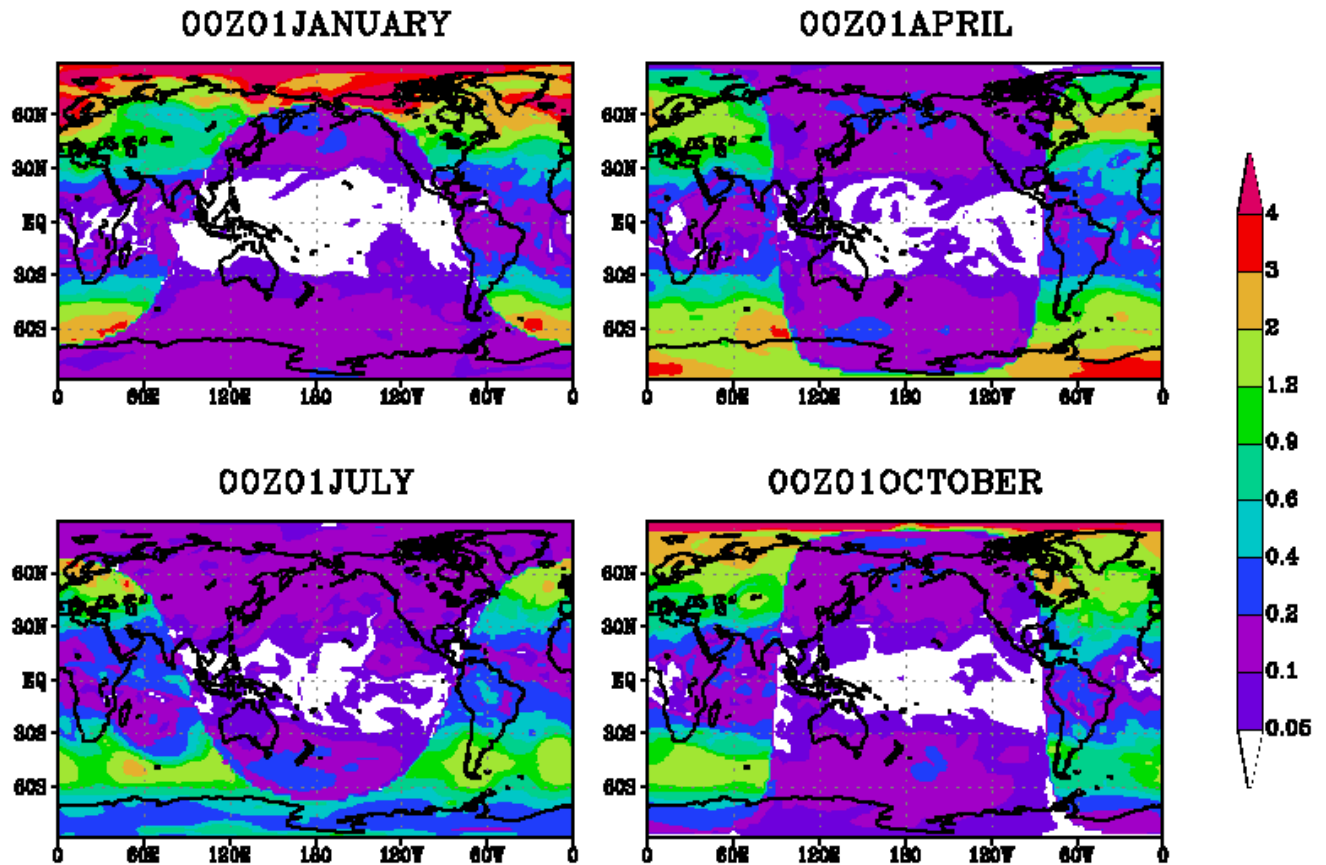


図 1.4-1 本モデルによる計算結果の例

(e) HNO₃ の体積混合比 (100hPa 面)

HNO₃[ppbv], 100[hPa]

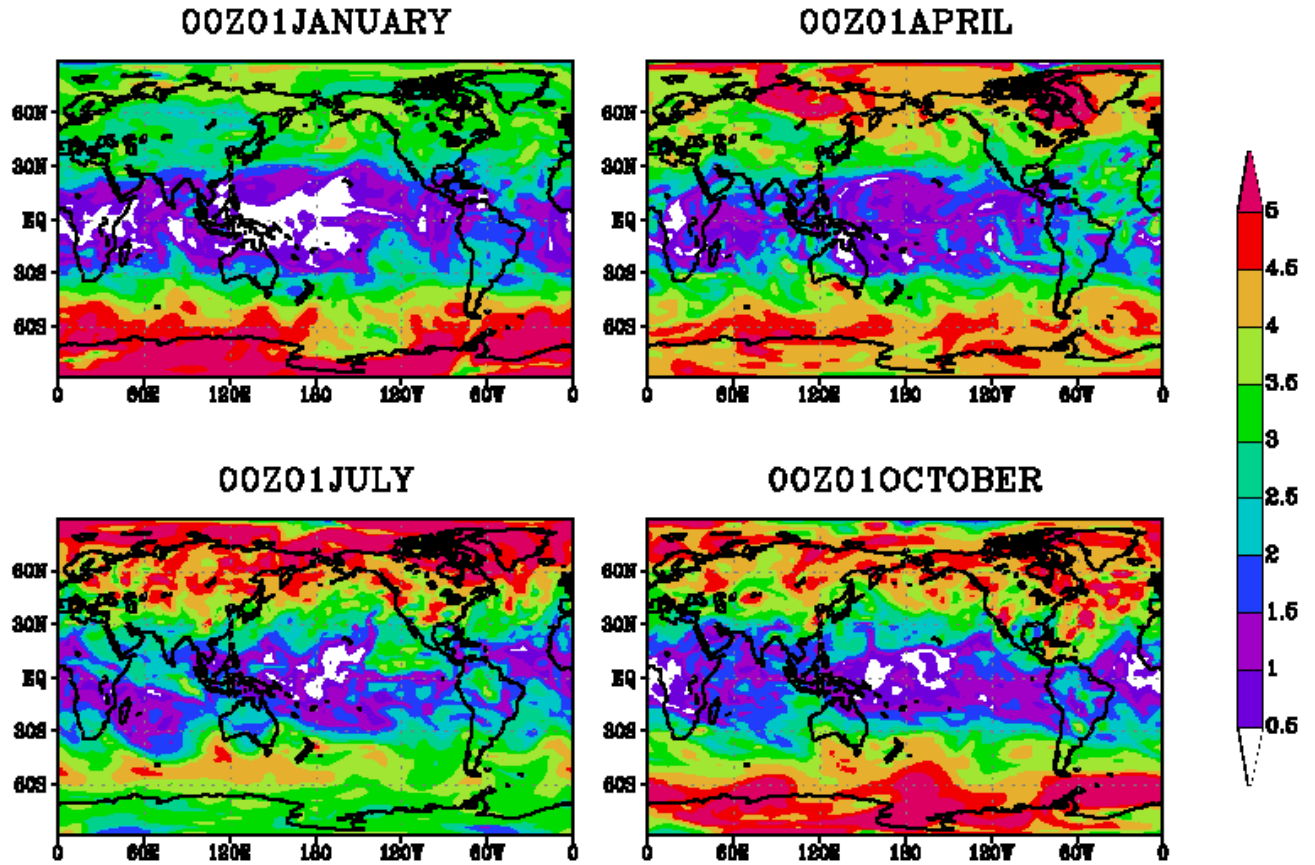
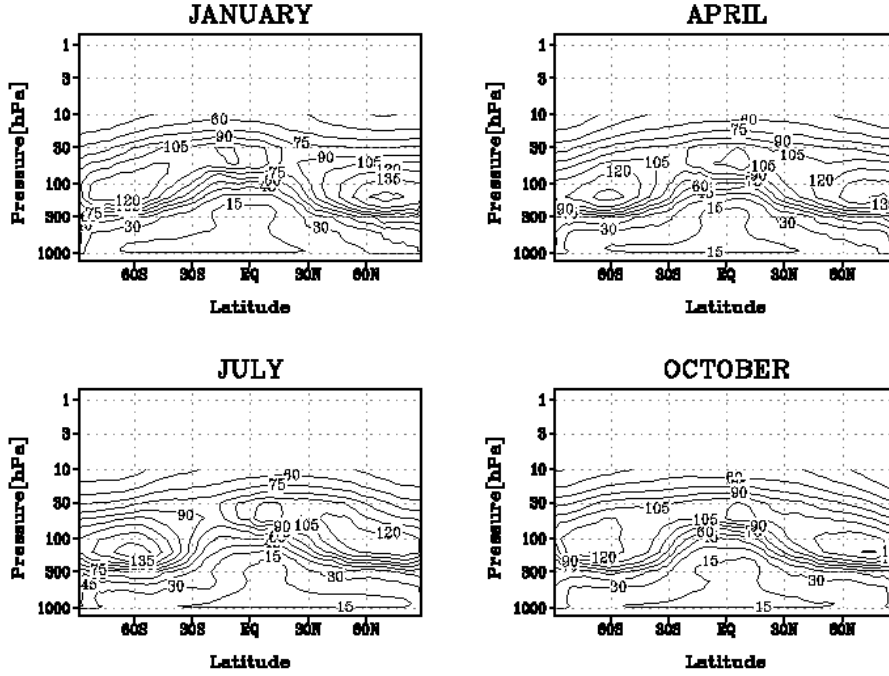


図 1.4-1 本モデルによる計算結果の例

(a) 本モデル計算値

OZONE Number Density[nb]



(b) 気候値

B1. OZONE CLIMATOLOGY (nb)

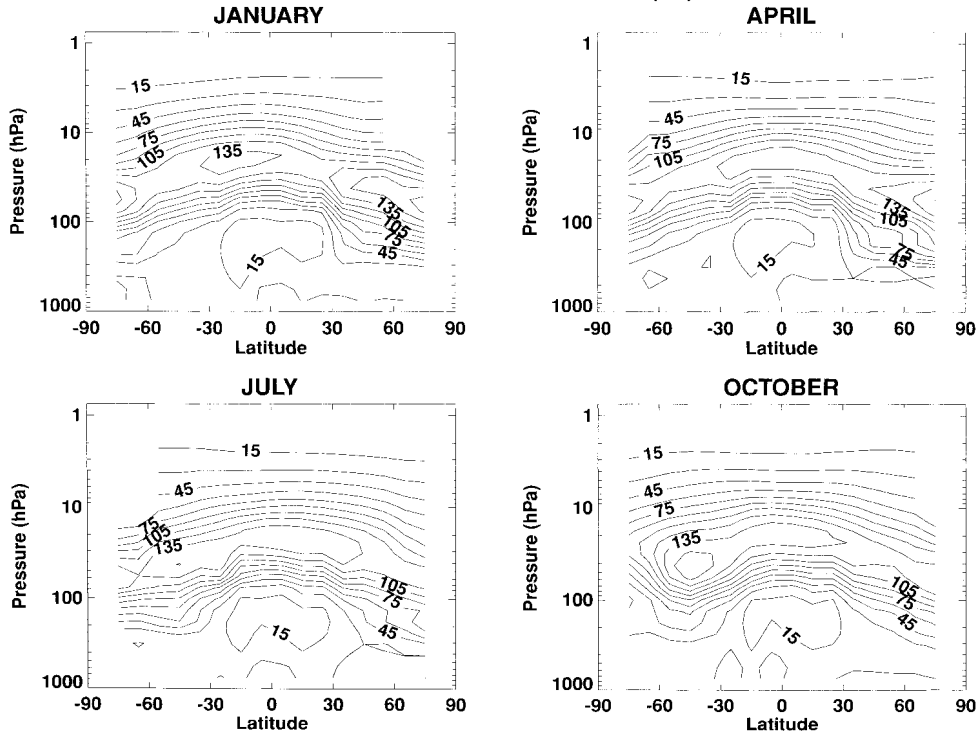
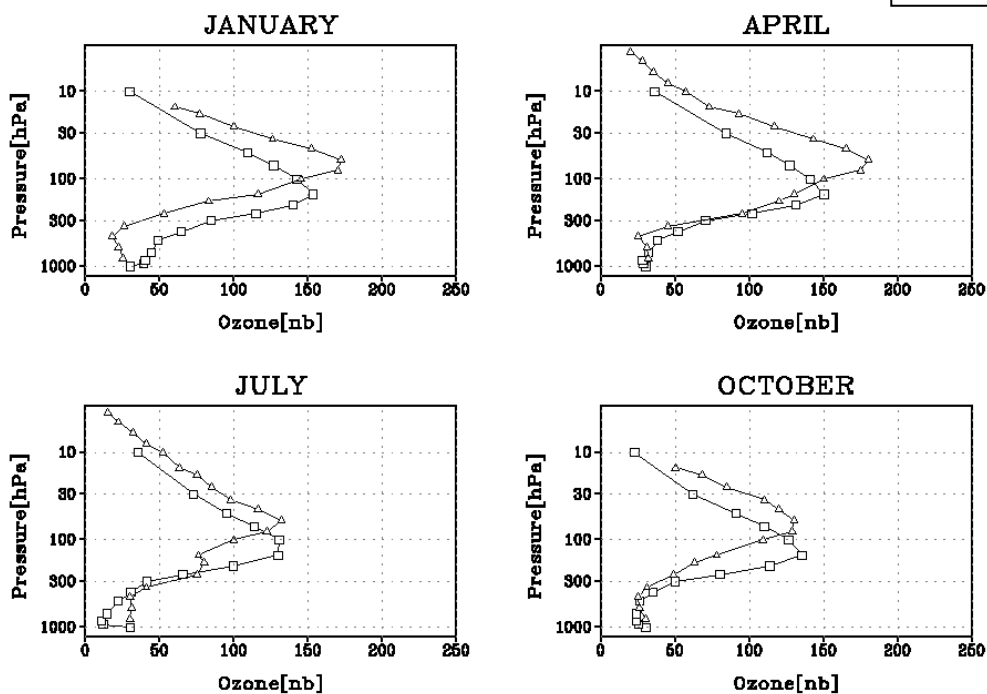


図 1.4-2 各季節のオゾン分圧の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 70-80N

□ 本モデル
△ 気候値



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 70-80N

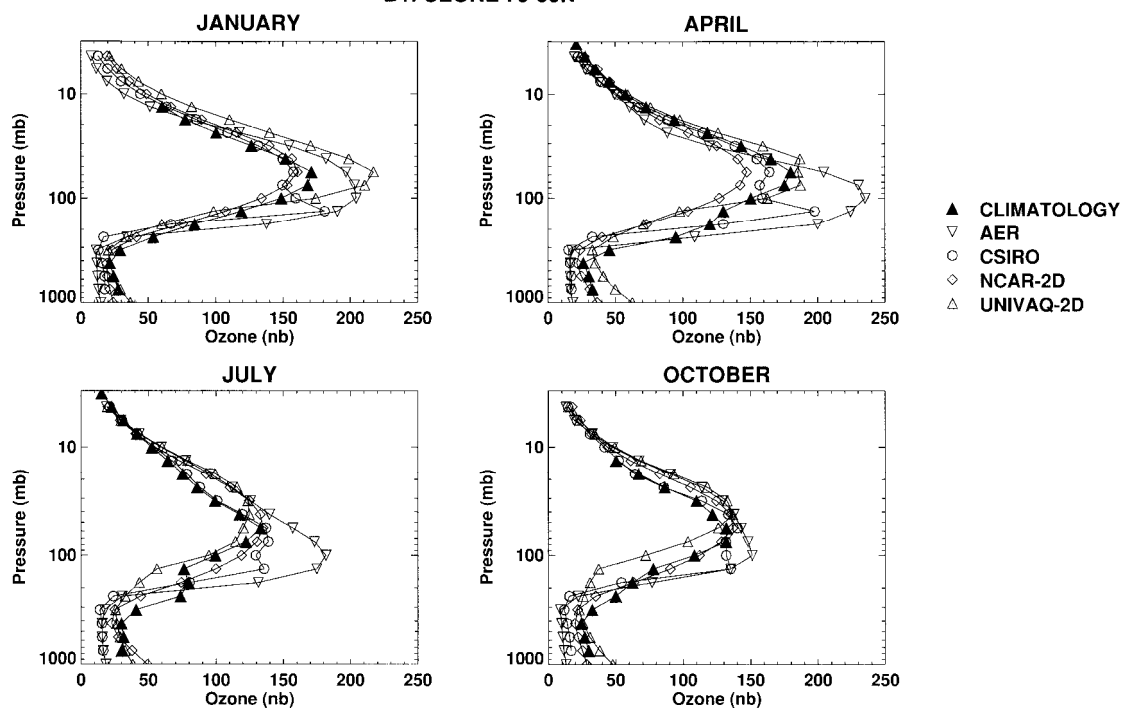
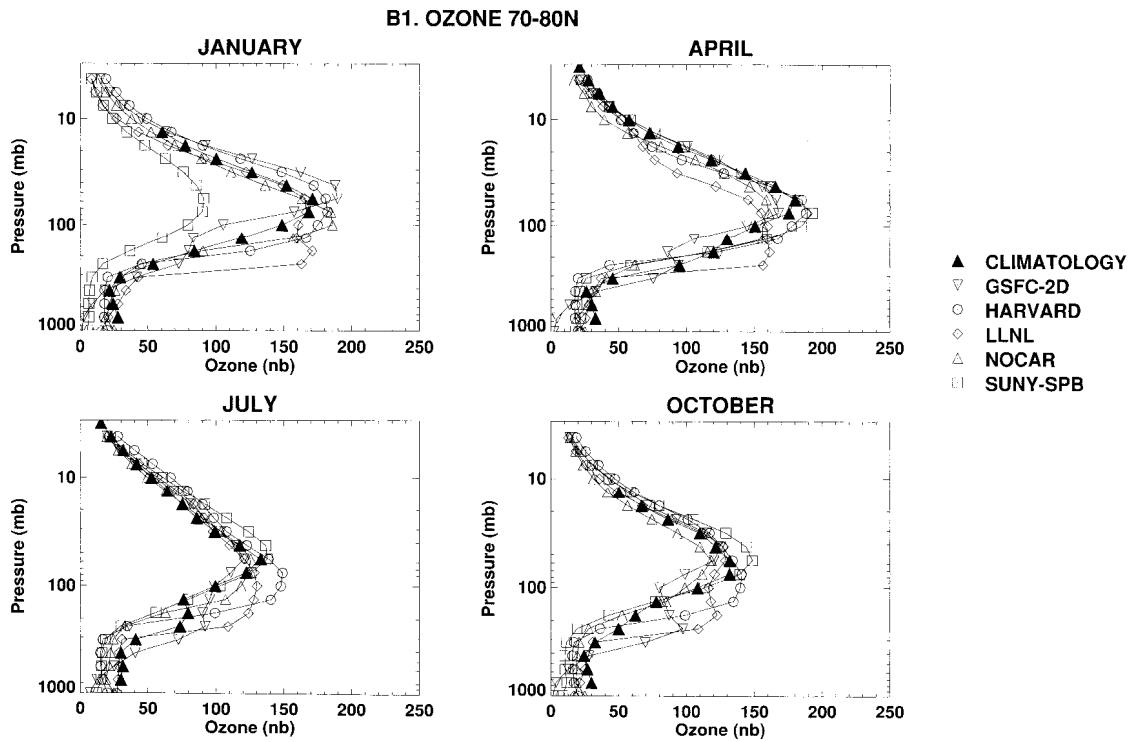


図 1.4-3 北半球高緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

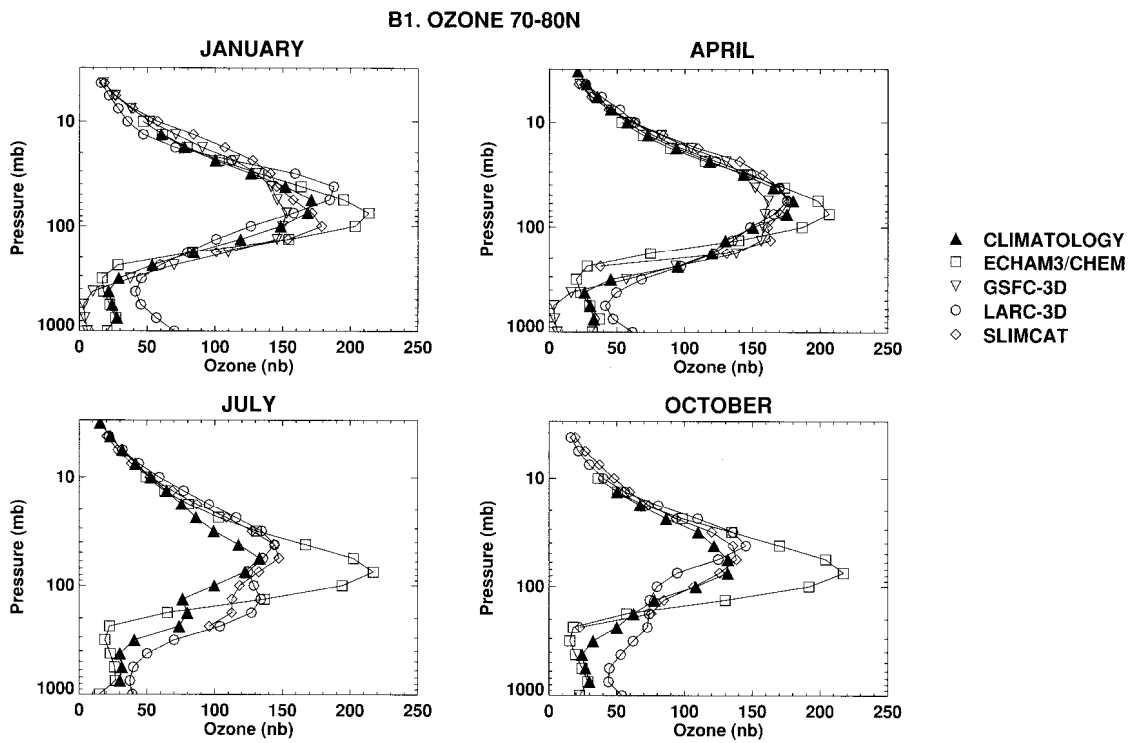
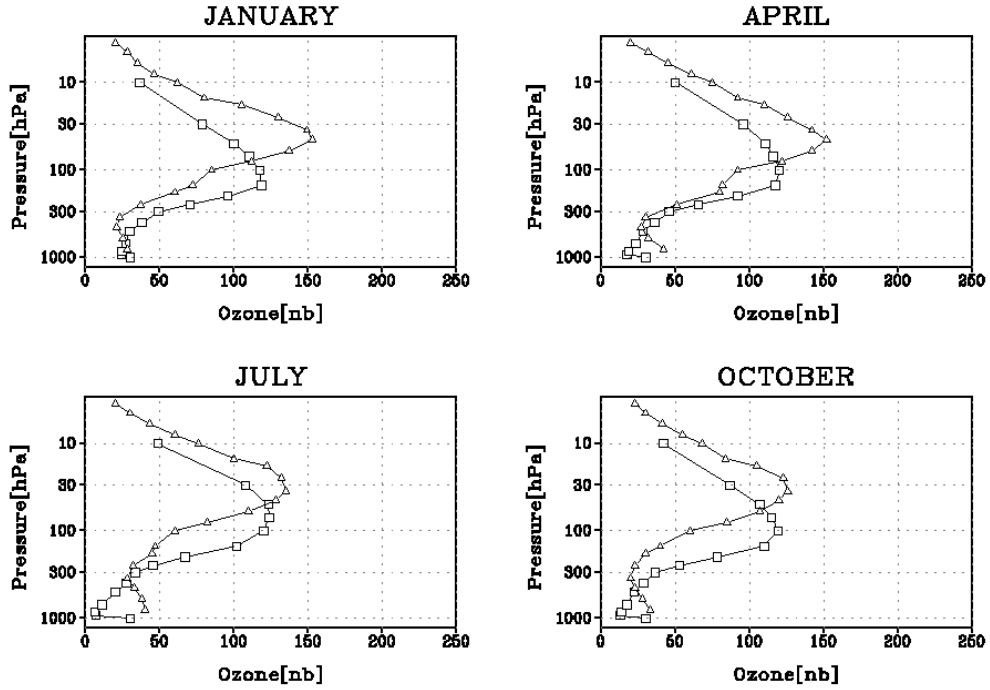
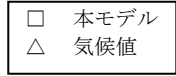


図 1.4-3 北半球高緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 40-50N



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 40-50N

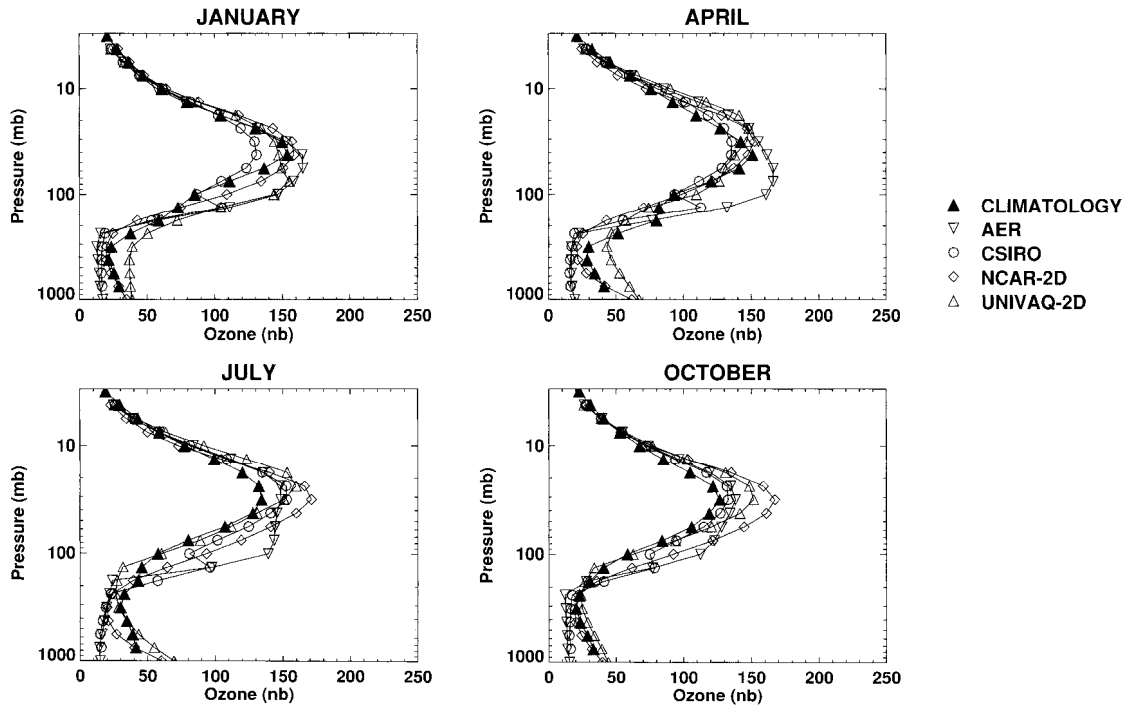
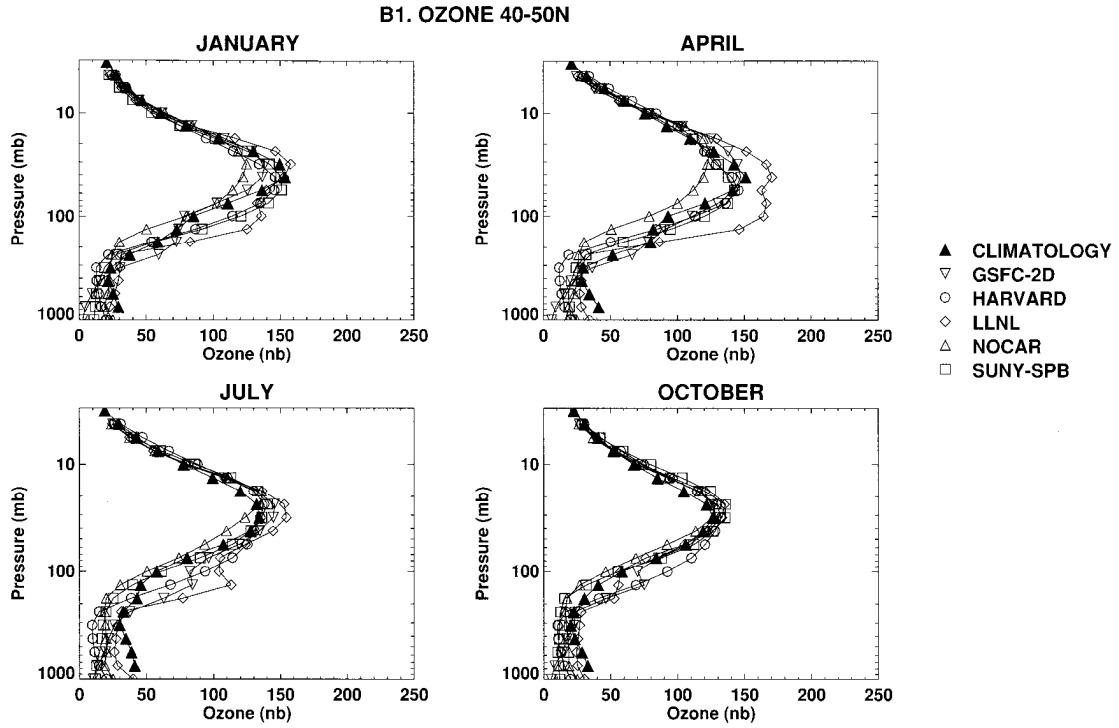


図 1.4-4 北半球中緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

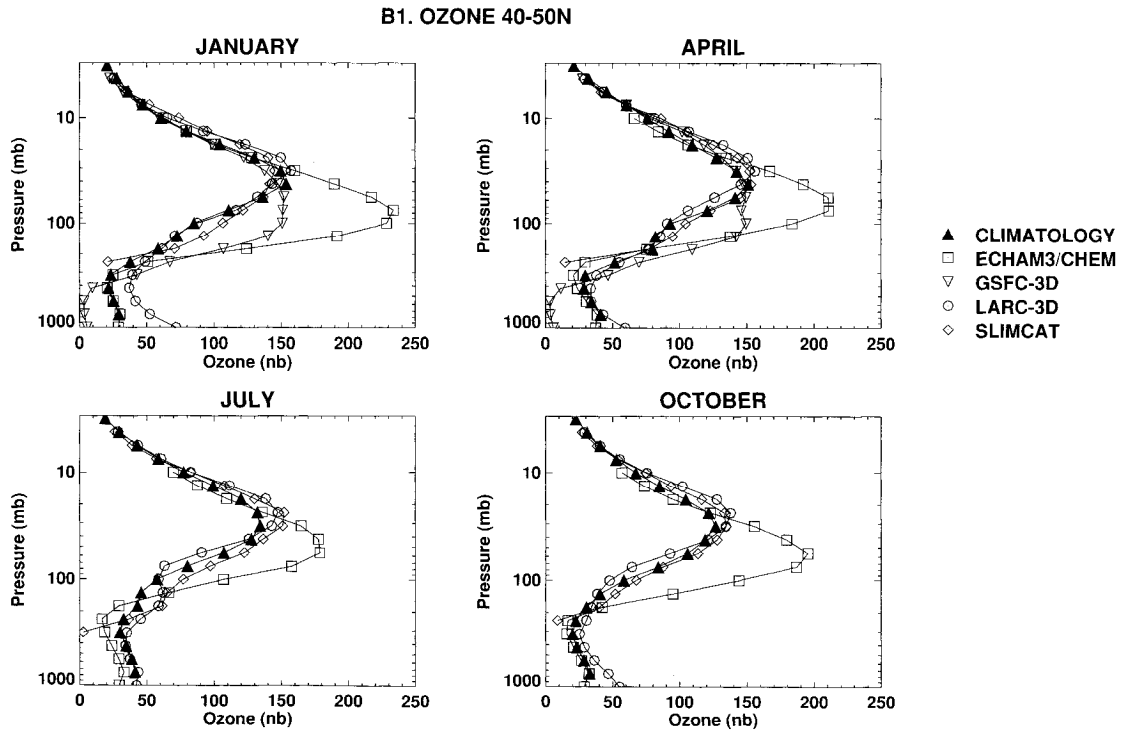
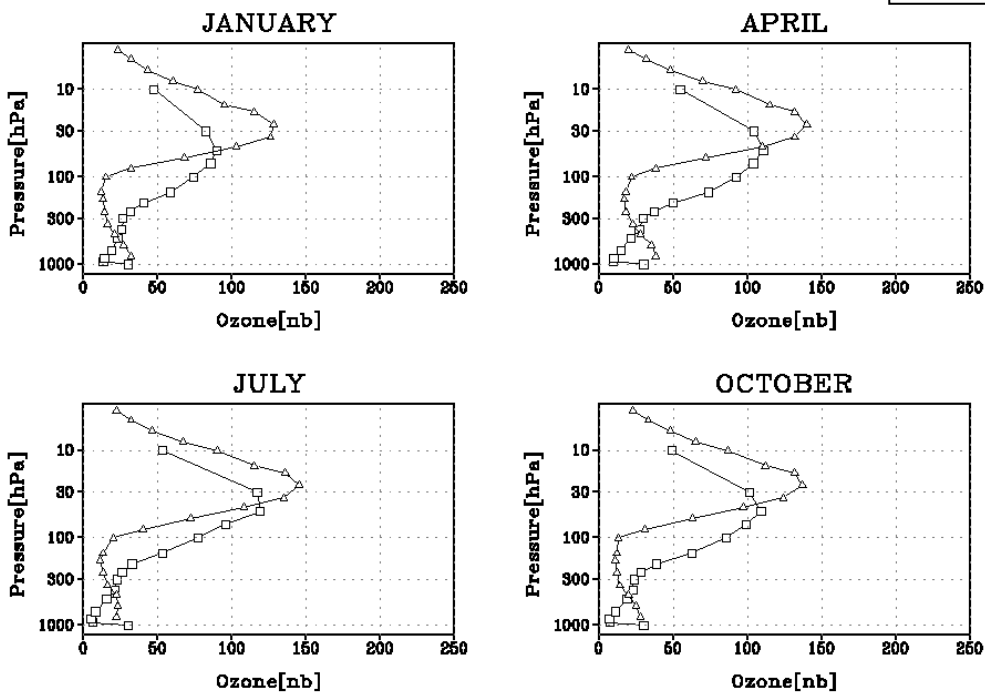
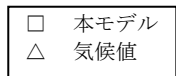


図 1.4-4 北半球中緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 20-30N



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 20-30N

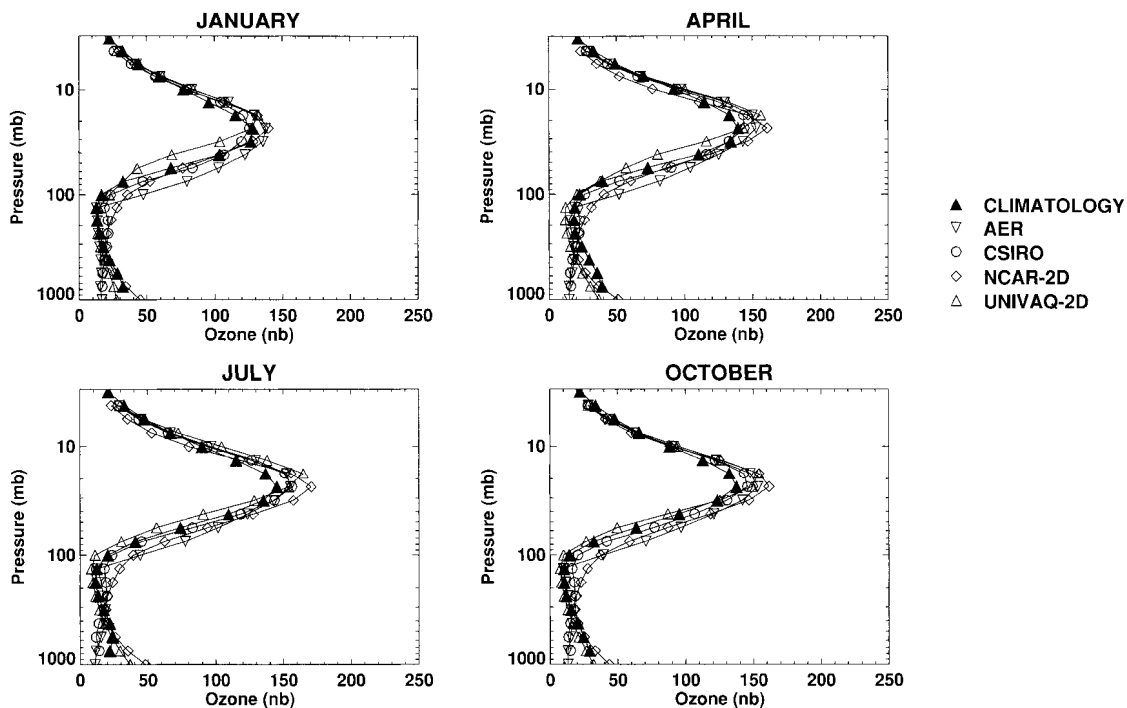
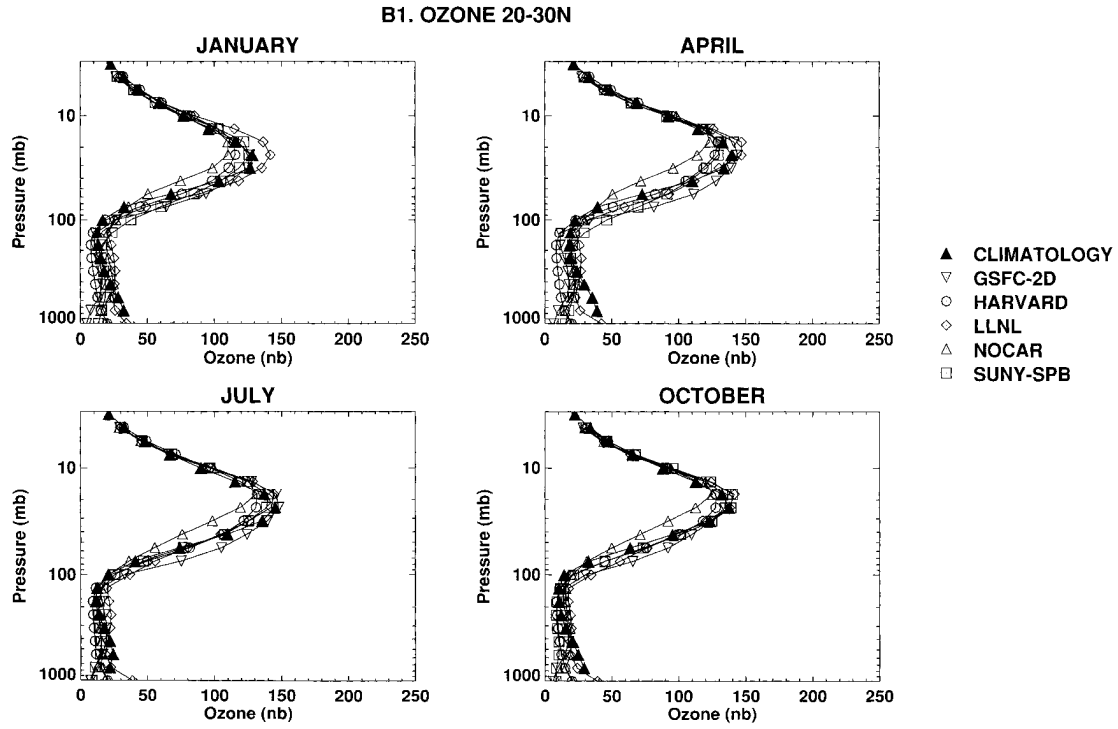


図 1.4-5 北半球亜熱帯域におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

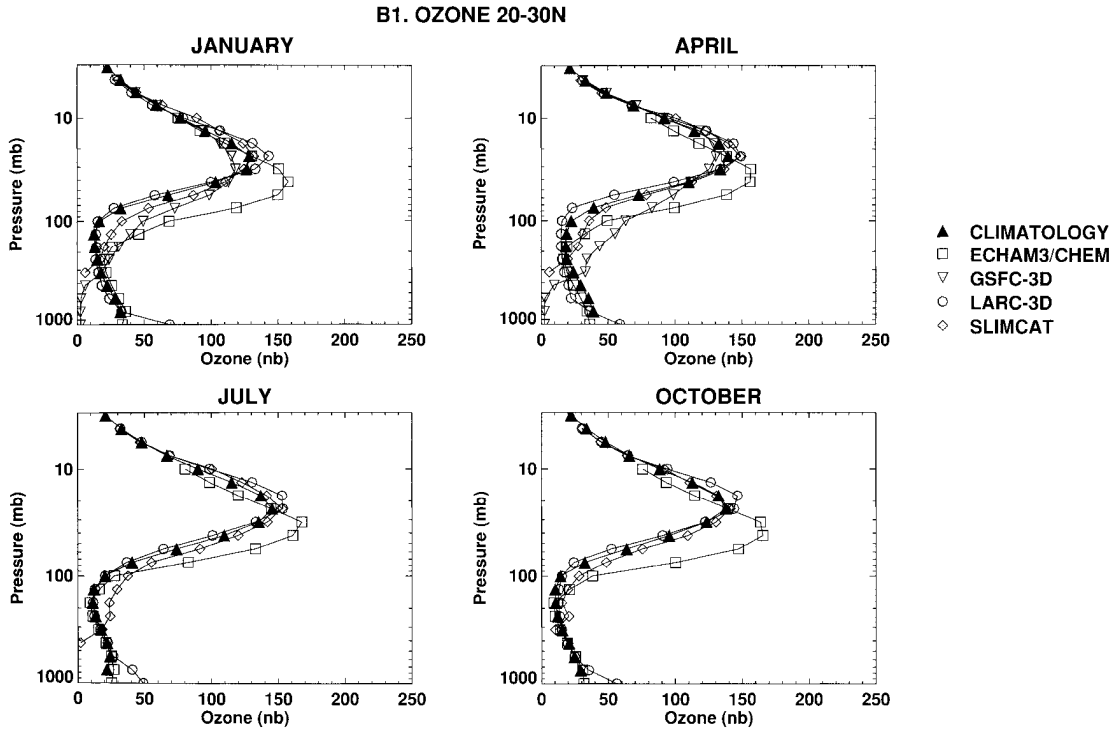
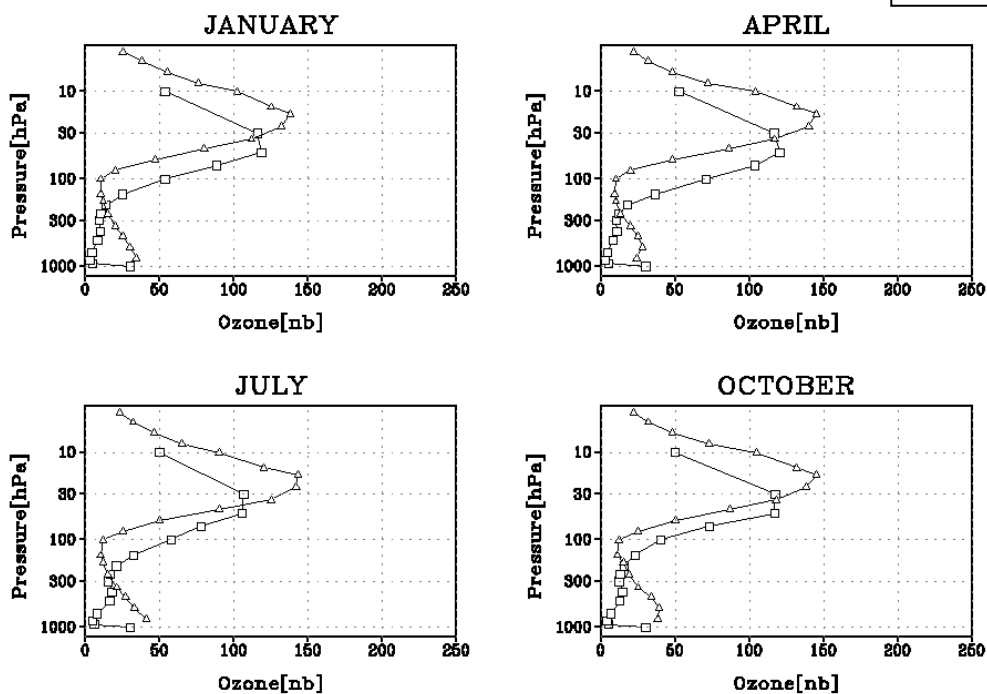
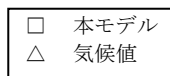


図 1.4-5 北半球亜熱帯域におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 10S-0



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 10S-0

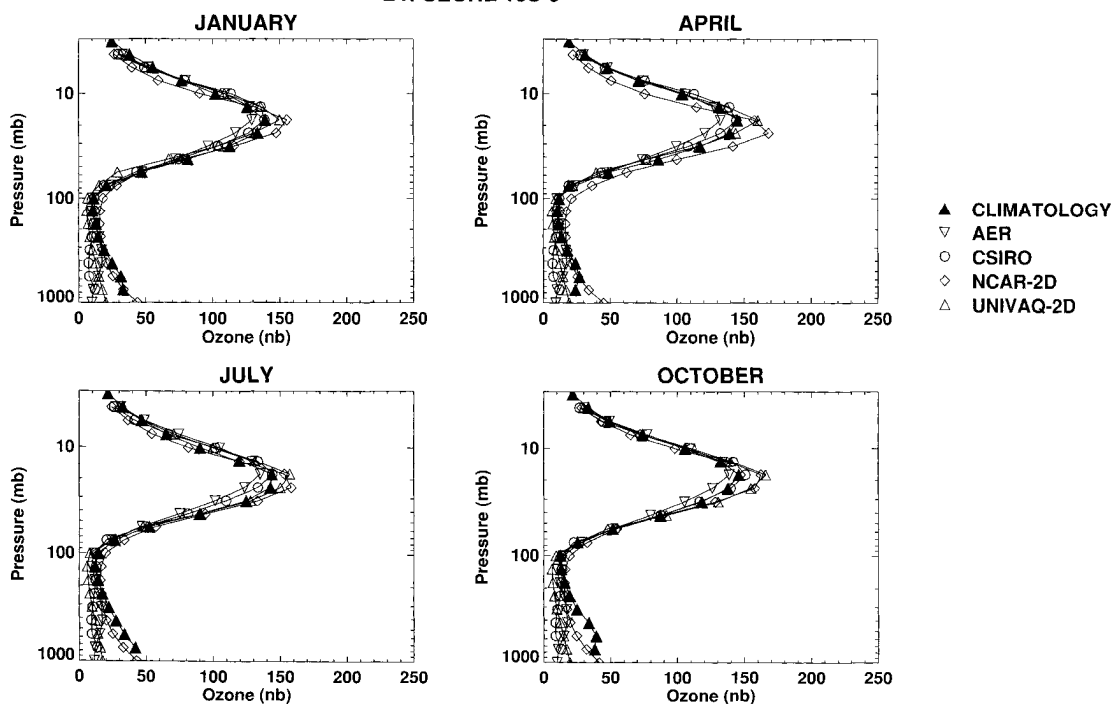
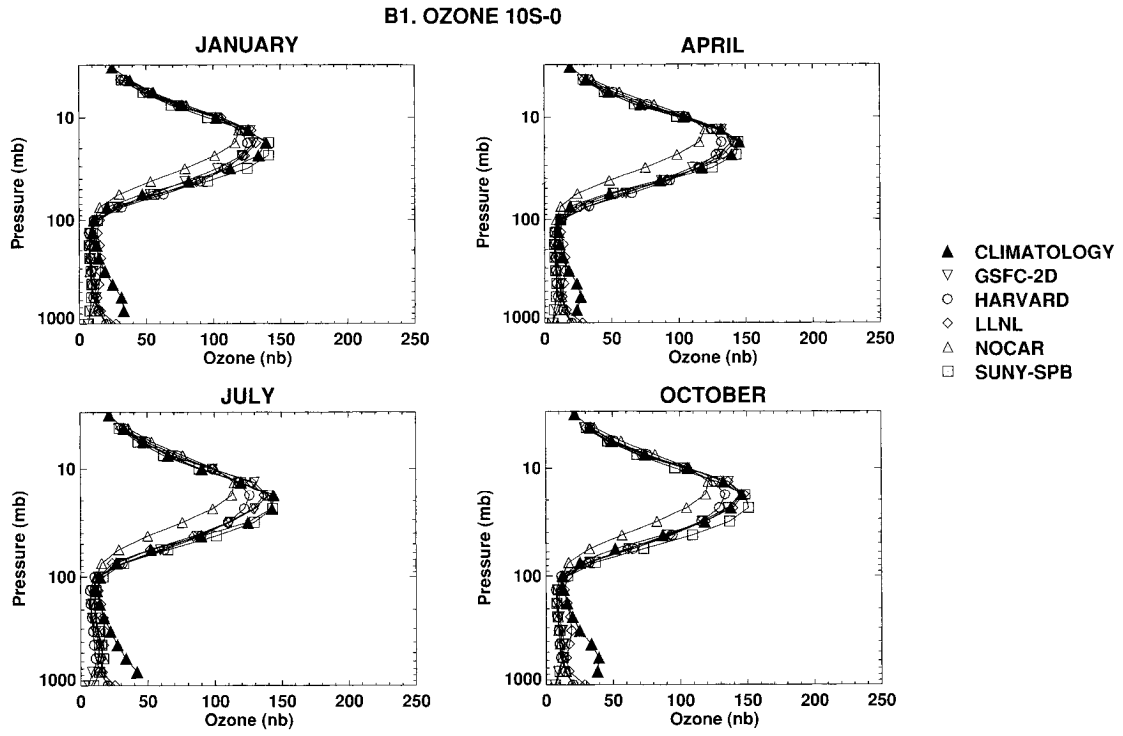


図 1.4-6 赤道域におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

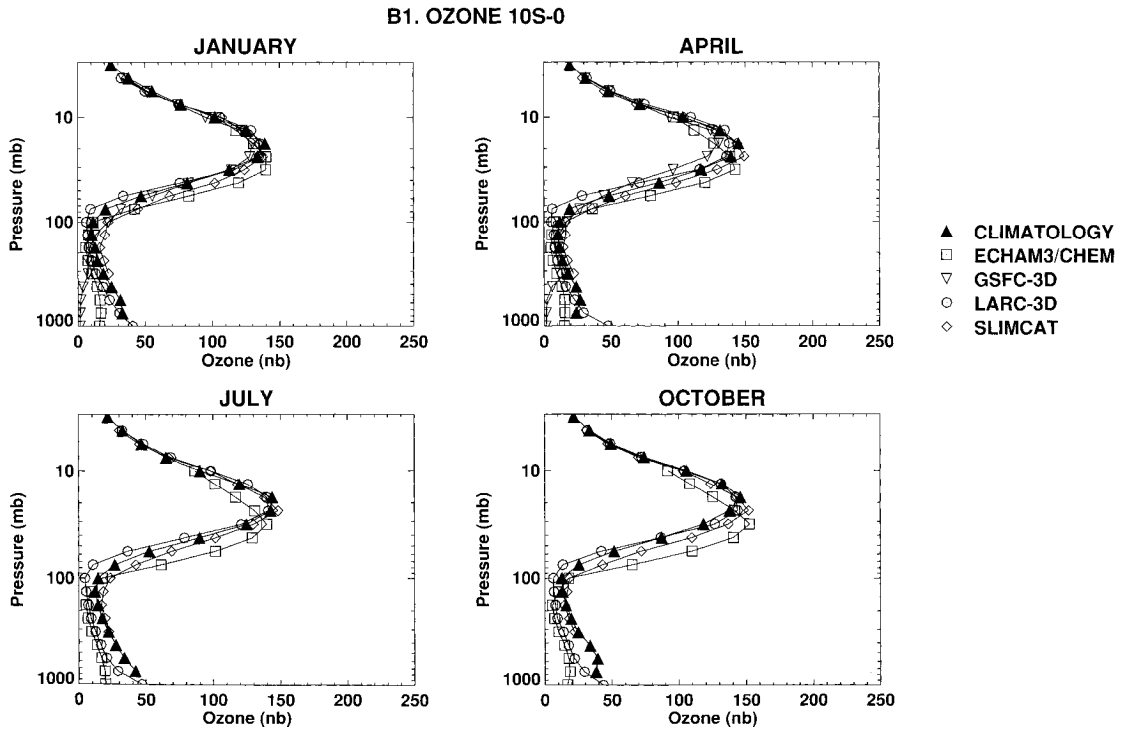
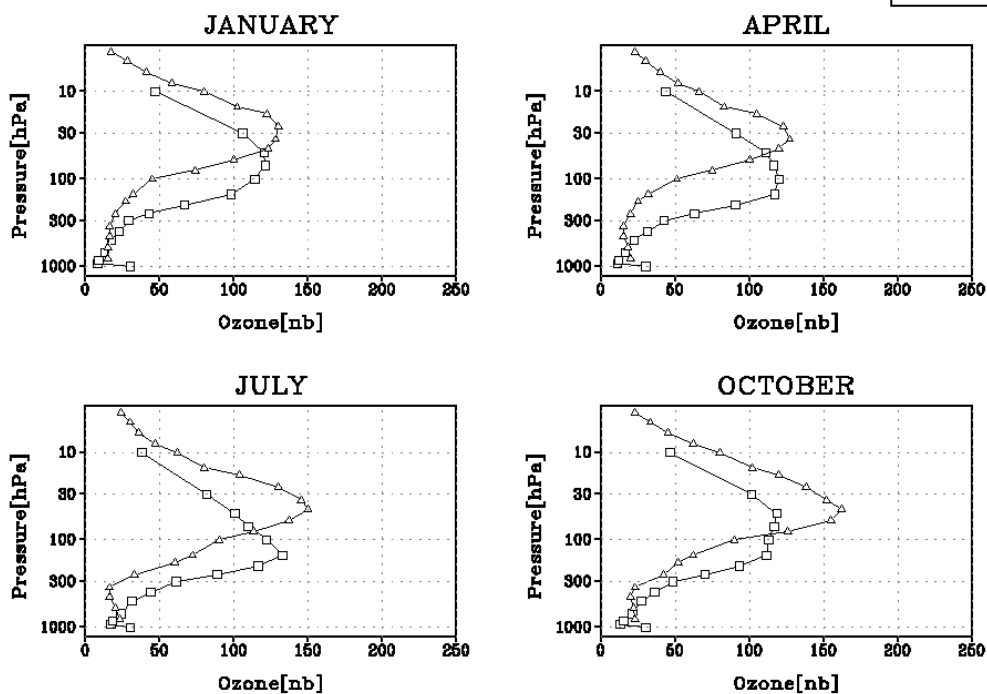


図 1.4-6 赤道域におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 50-40S

□ 本モデル
△ 気候値



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 40-50S

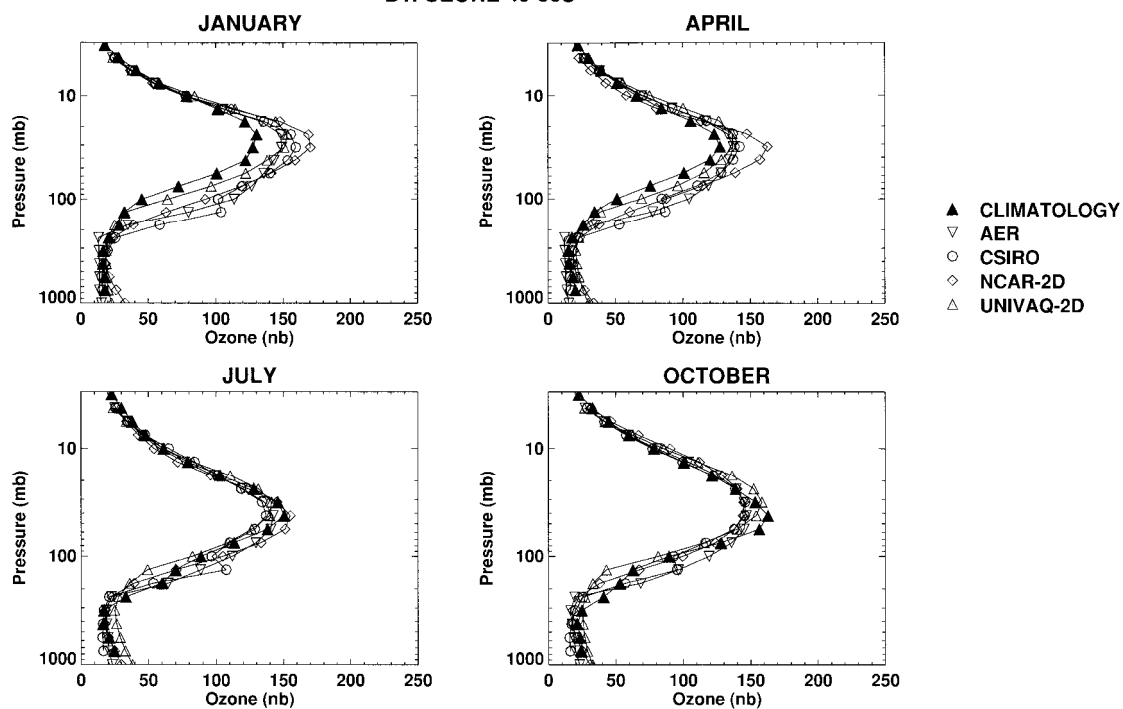
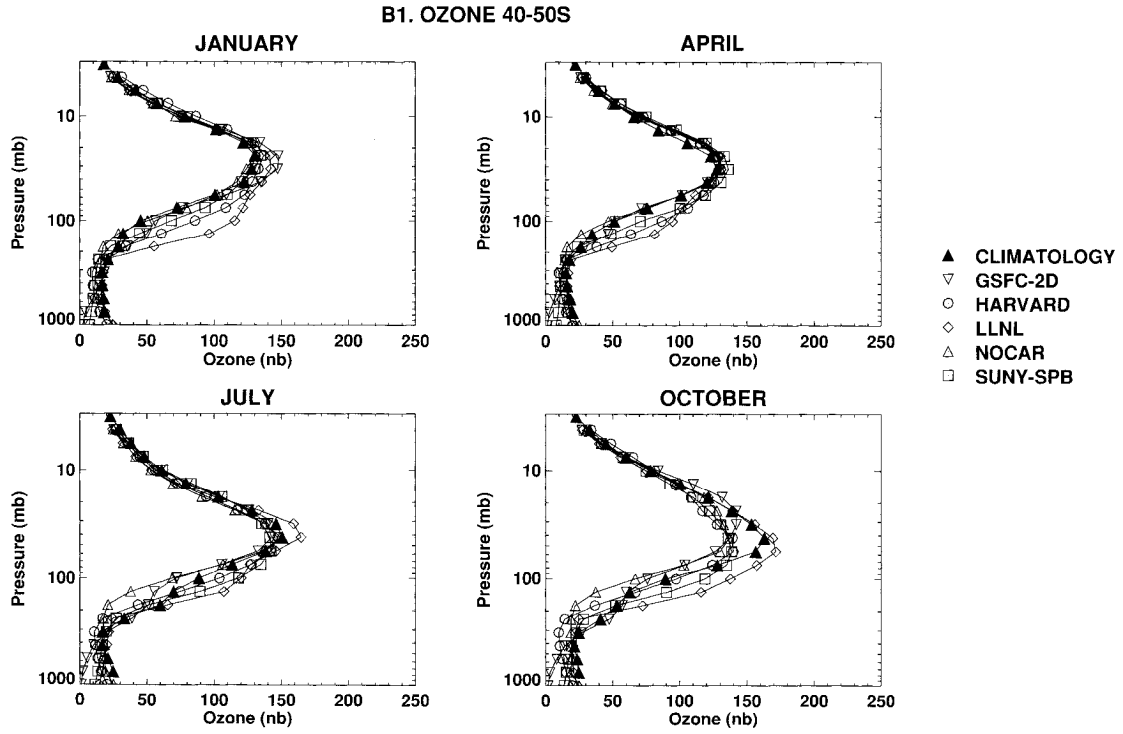


図 1.4-7 南半球中緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

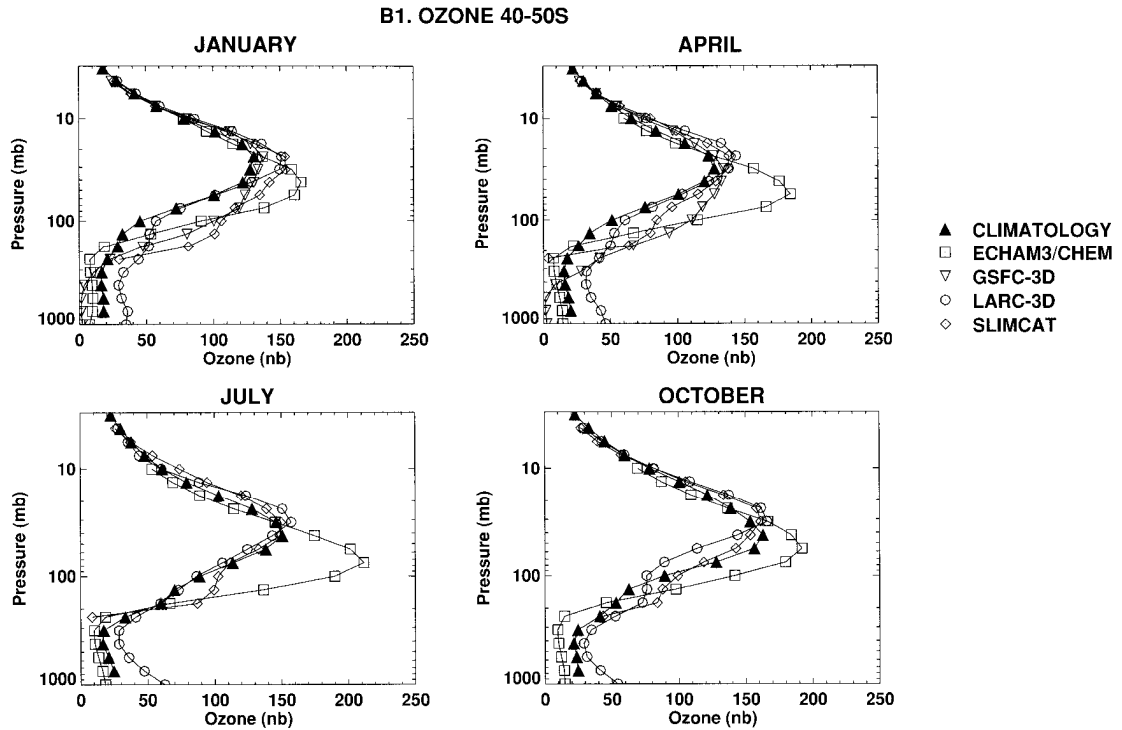
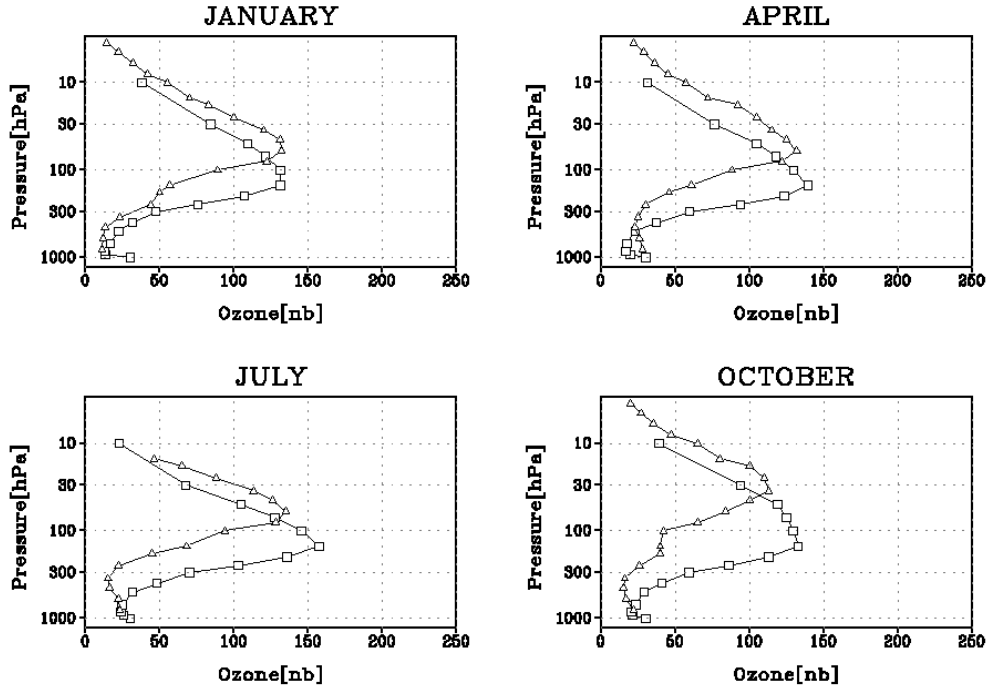
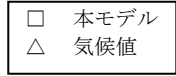


図 1.4-7 南半球中緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 70-60S



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 60-70S

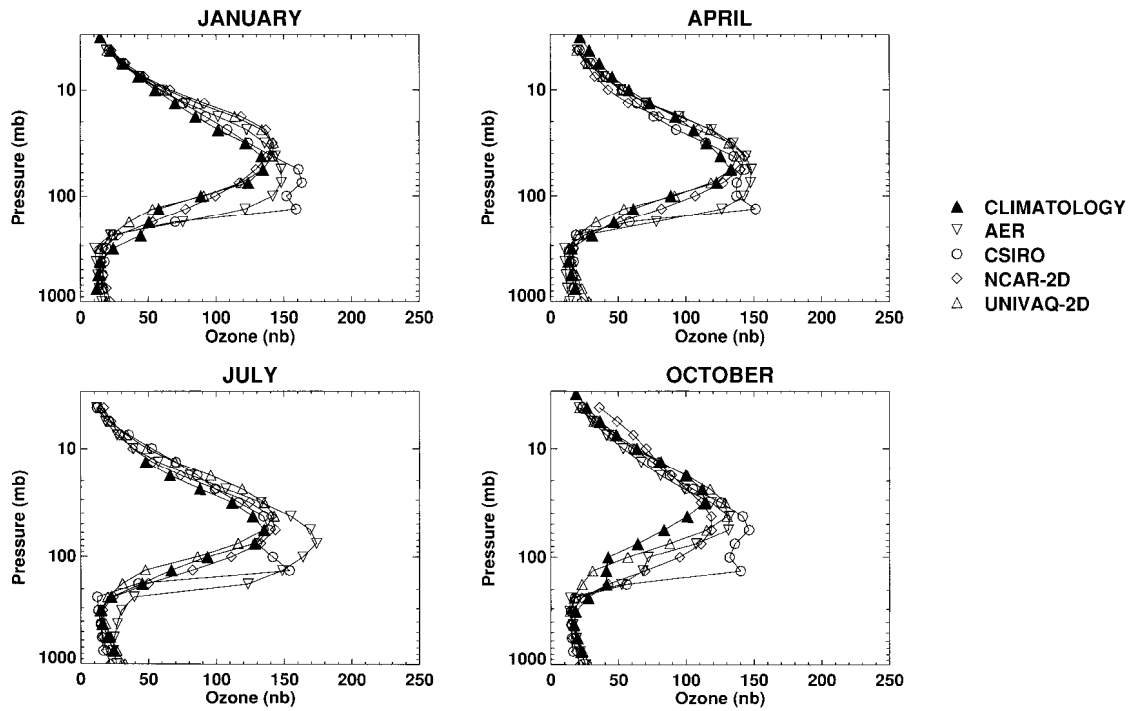
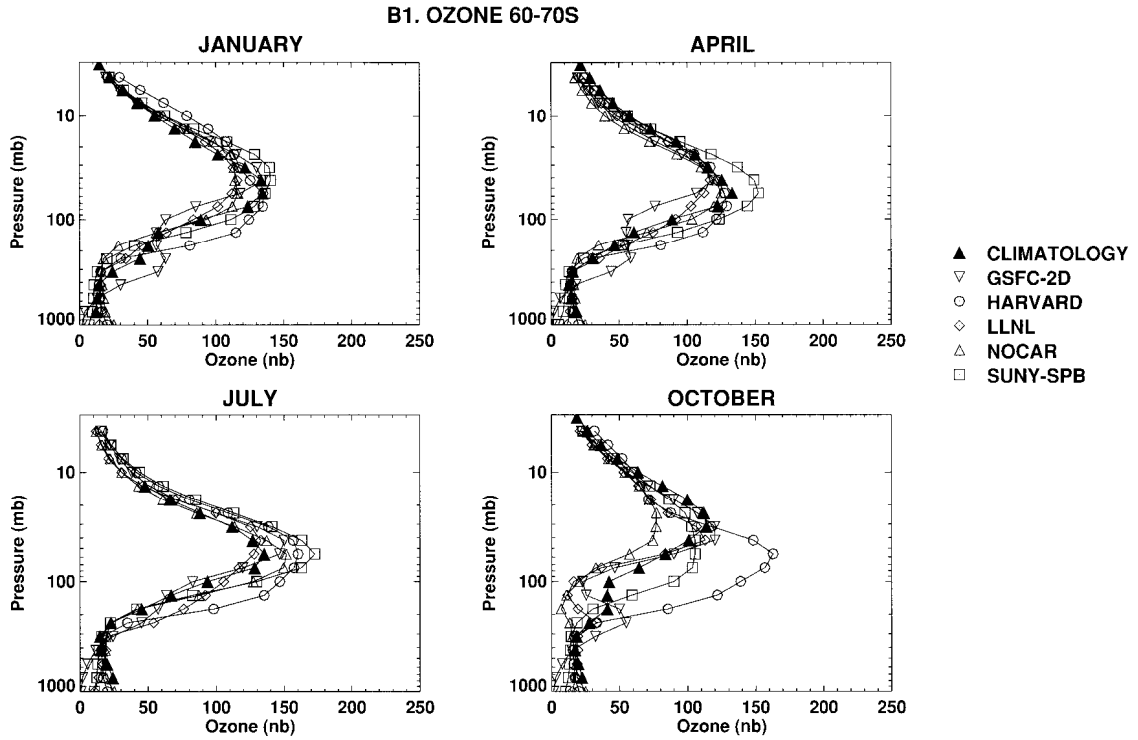


図 1.4-8 南半球高緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

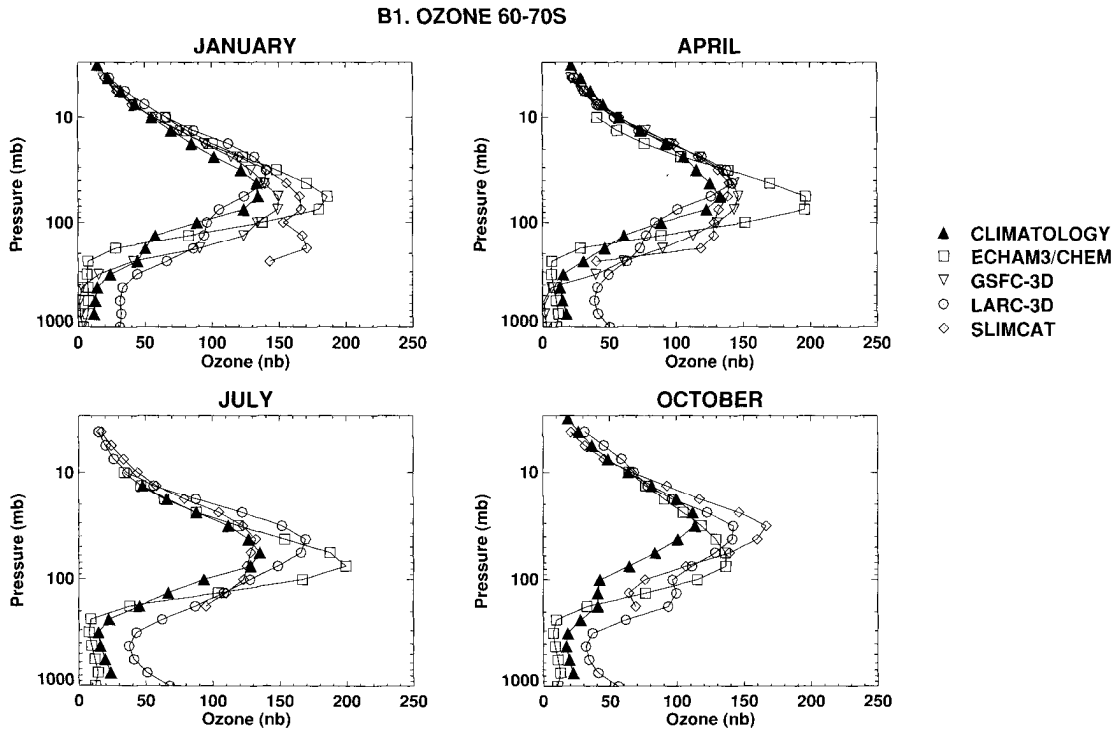
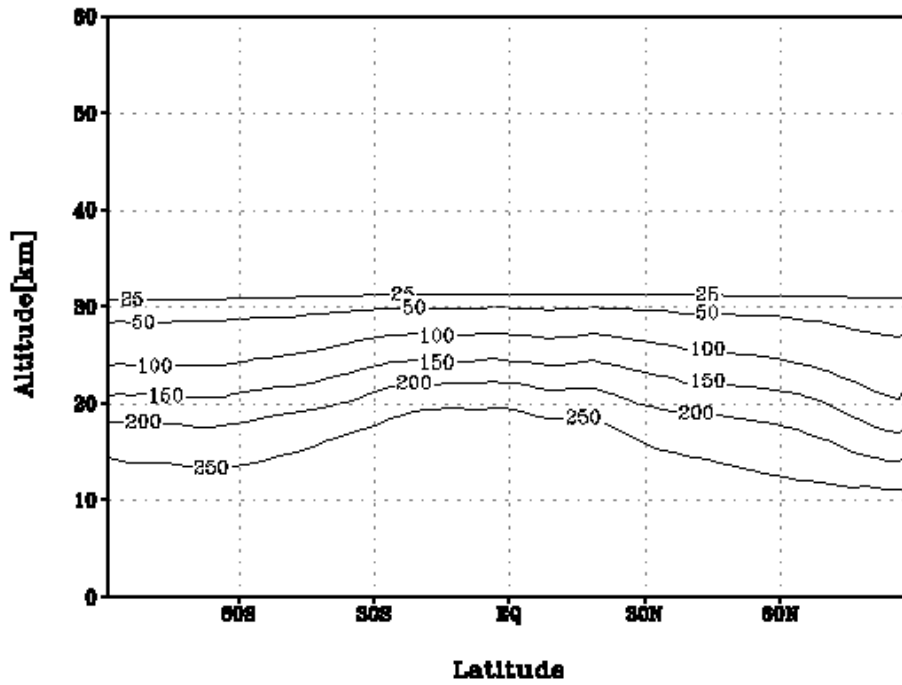


図 1.4-8 南半球高緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

N₂O[ppbv], March 1994



(b) 人工衛星観測値

CLAES N₂O MAR - APR 1992

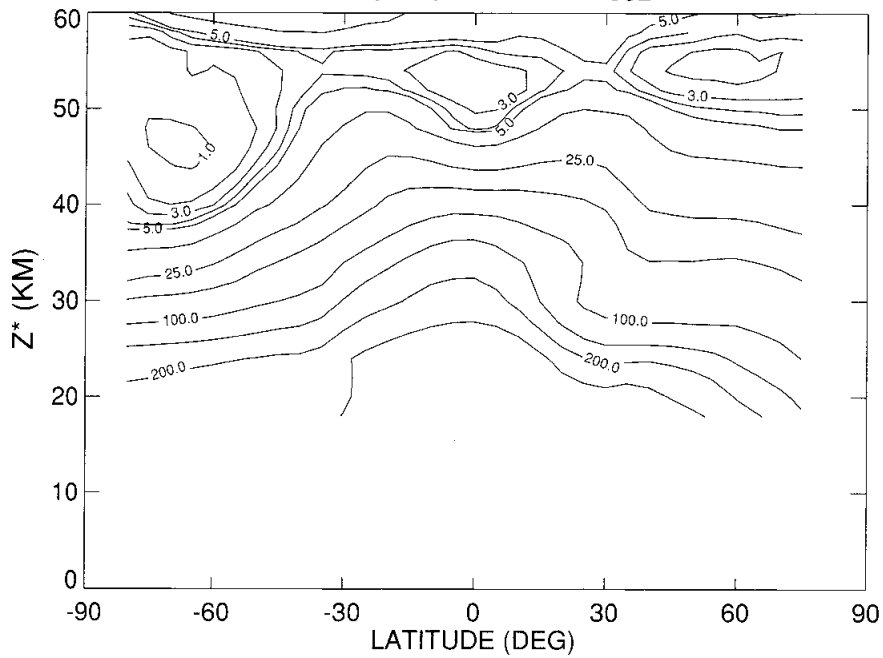
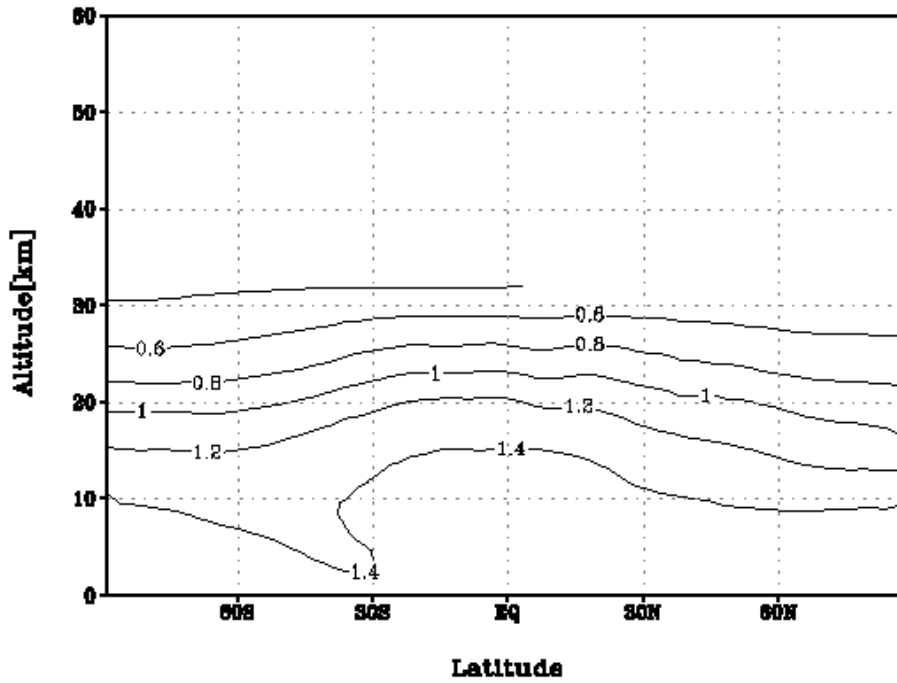


図 1.4-9 N₂O 体積混合比の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

CH₄[ppmv], April 1994



(b) 人工衛星観測値

HALOE CH₄ March→April 1992

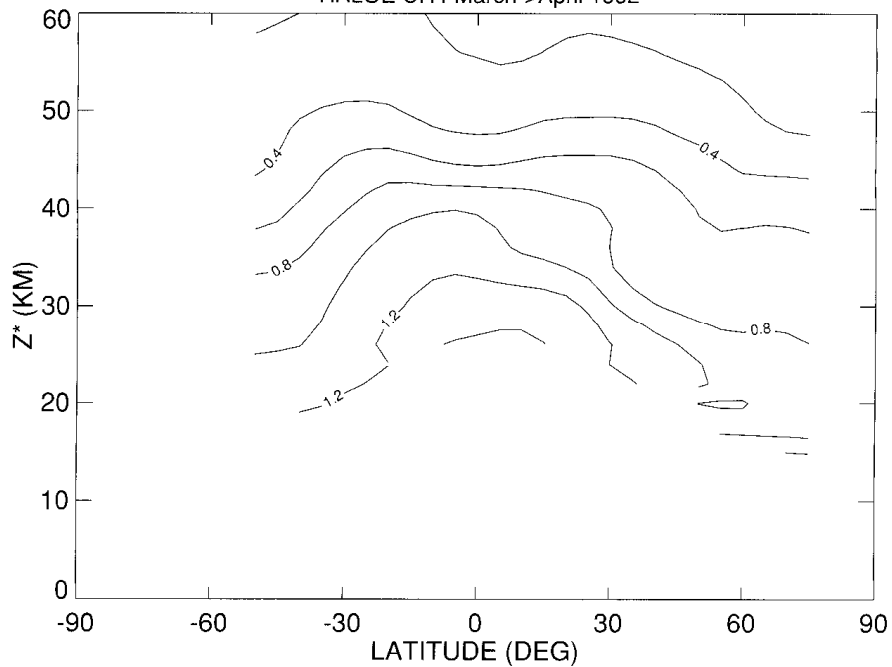
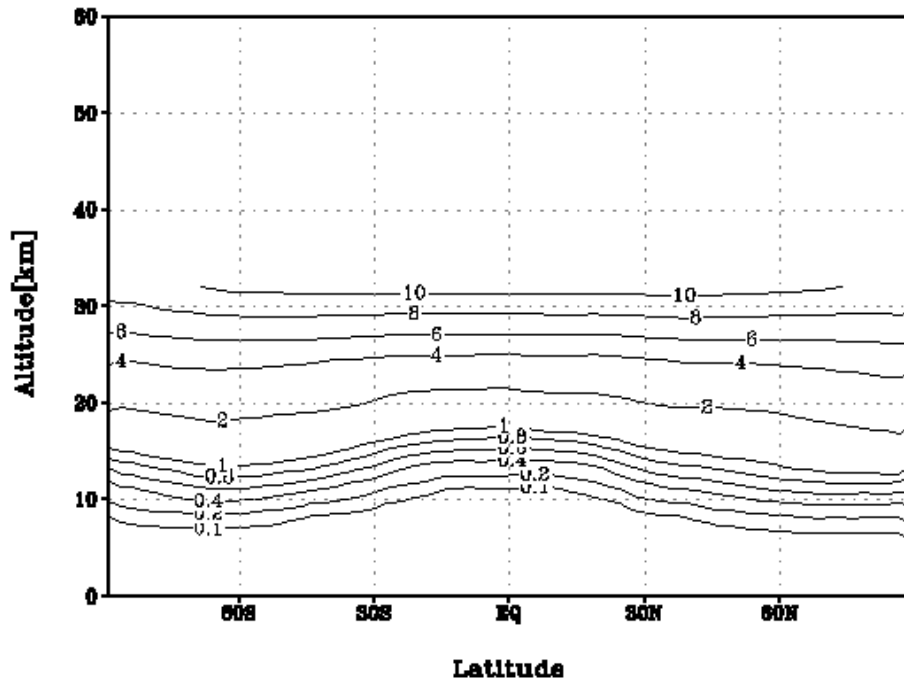


図 1.4-10 CH₄ 体積混合比の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

NO+NO₂[ppbv], March 1994



(b) 人工衛星観測値

HALOE NO+NO₂ March 1993

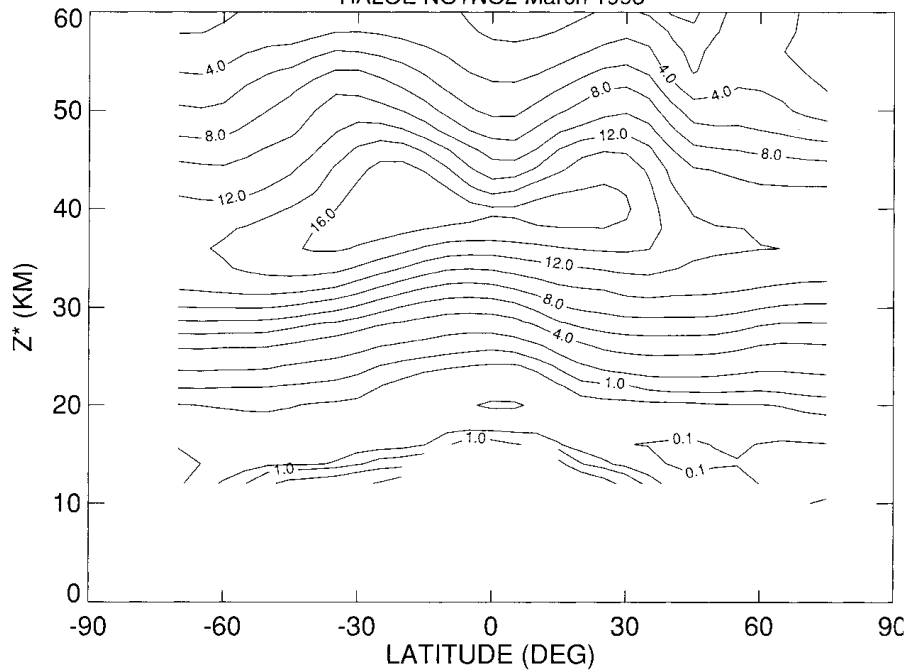
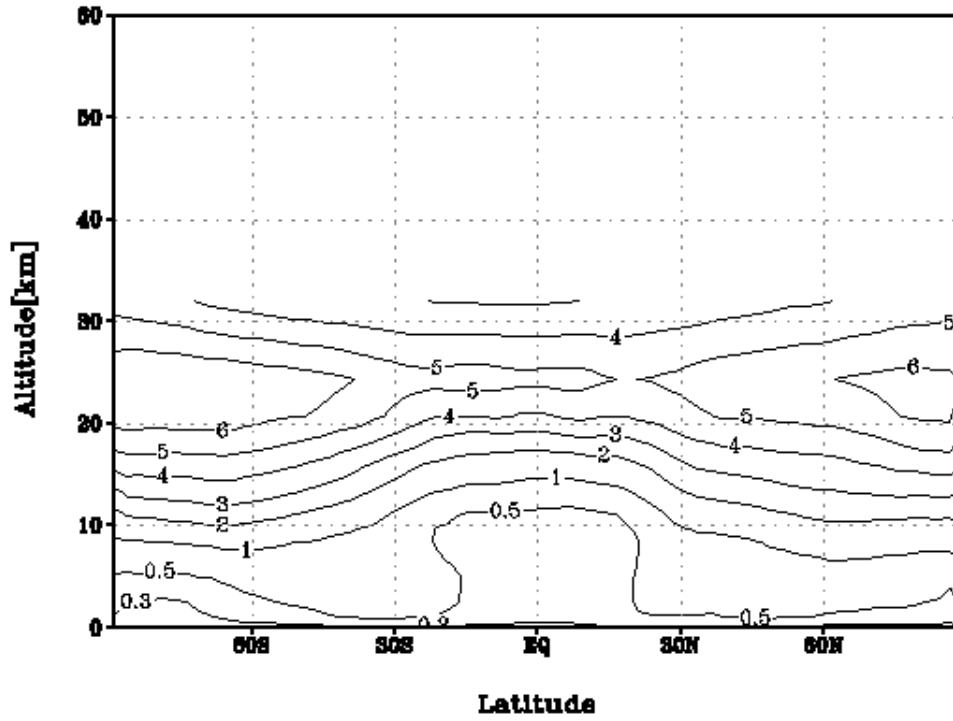


図 1.4-11 NO_x 体積混合比の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

HNO₃[ppbv], March 1994



(b) 人工衛星観測値

CLAES HNO₃ MAR 1993

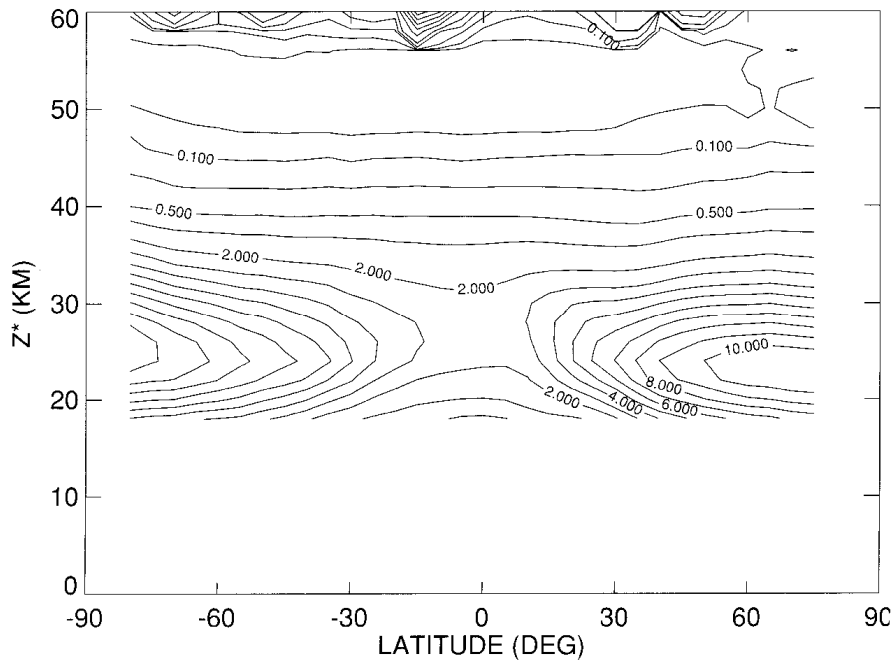
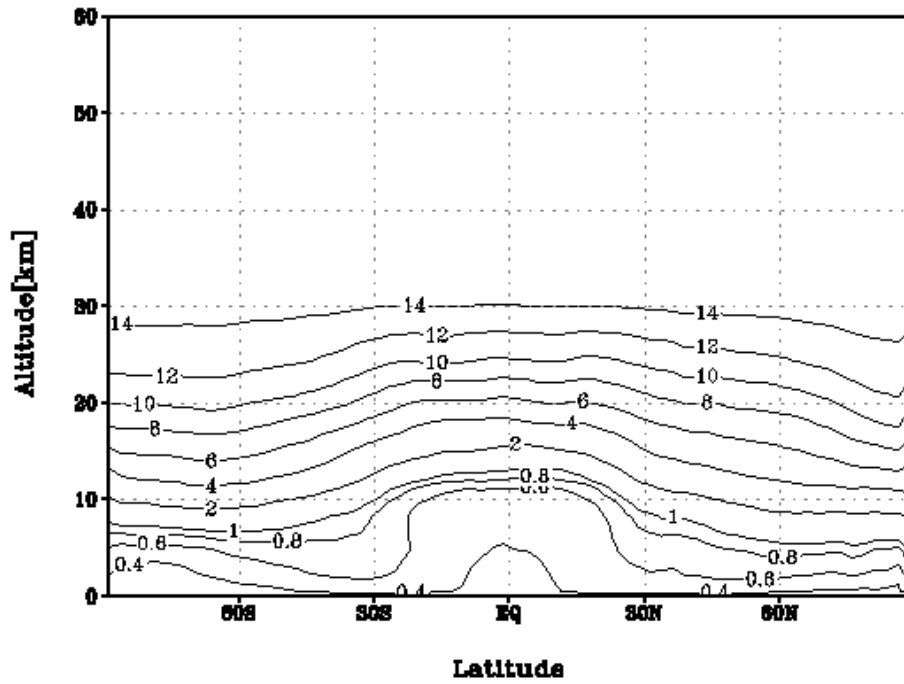


図 1.4-12 HNO₃ 体積混合比の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

NO_y[ppbv], March 1994



(b) 観測値

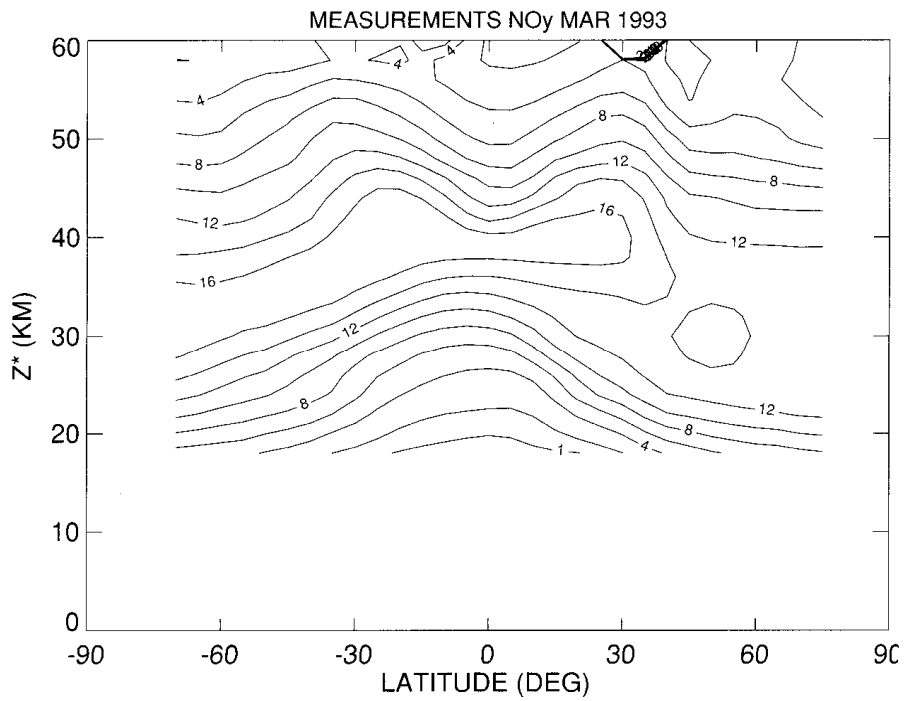
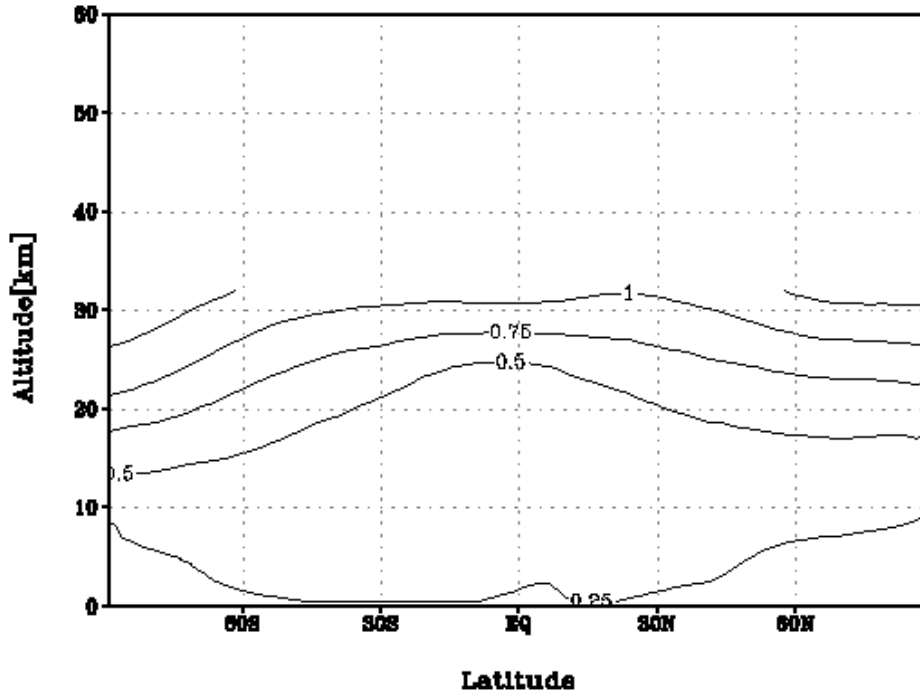


図 1.4-13 NO_y 体積混合比の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

HCl[ppbv], March 1994



(b) 人工衛星観測値

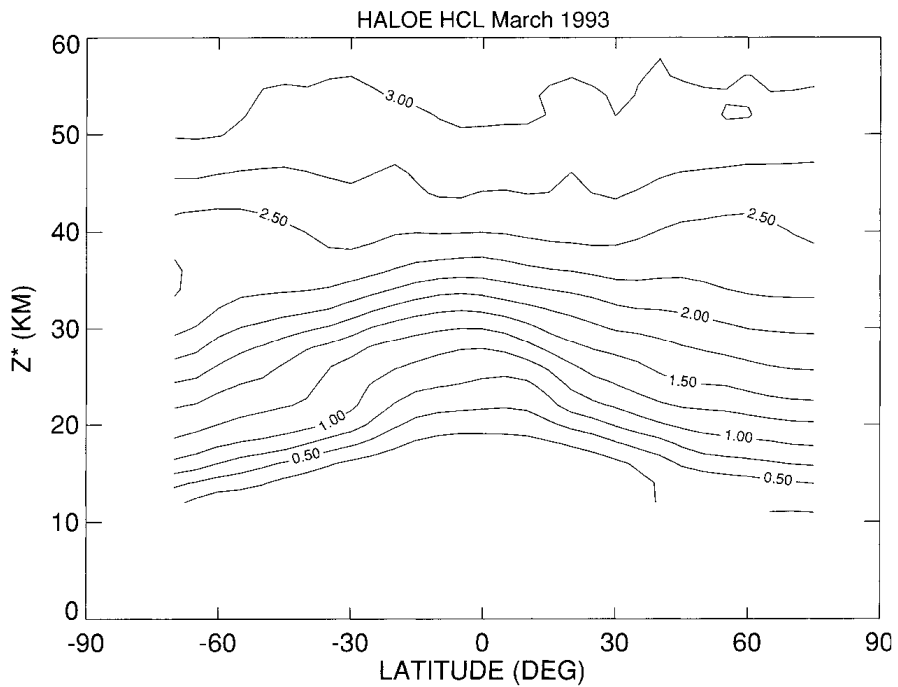


図 1.4-14 HCl 体積混合比の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

HNO₃[ppbv], June 1994

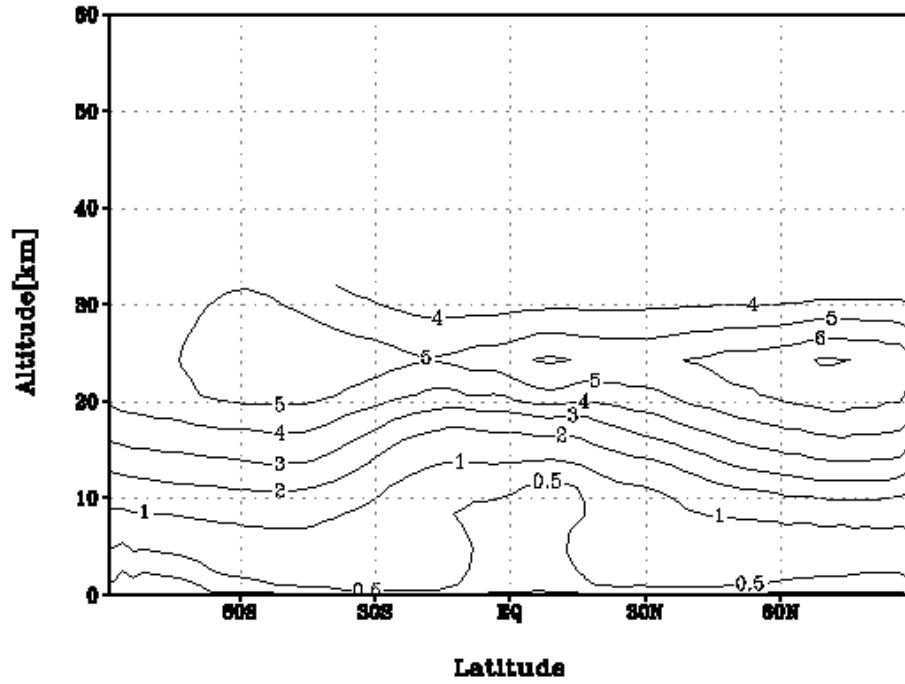


図 1.4-15 6月の HNO₃体積混合比の子午面分布の比較

(b) 他のモデル計算値(1)

B1. HNO₃ JUNE

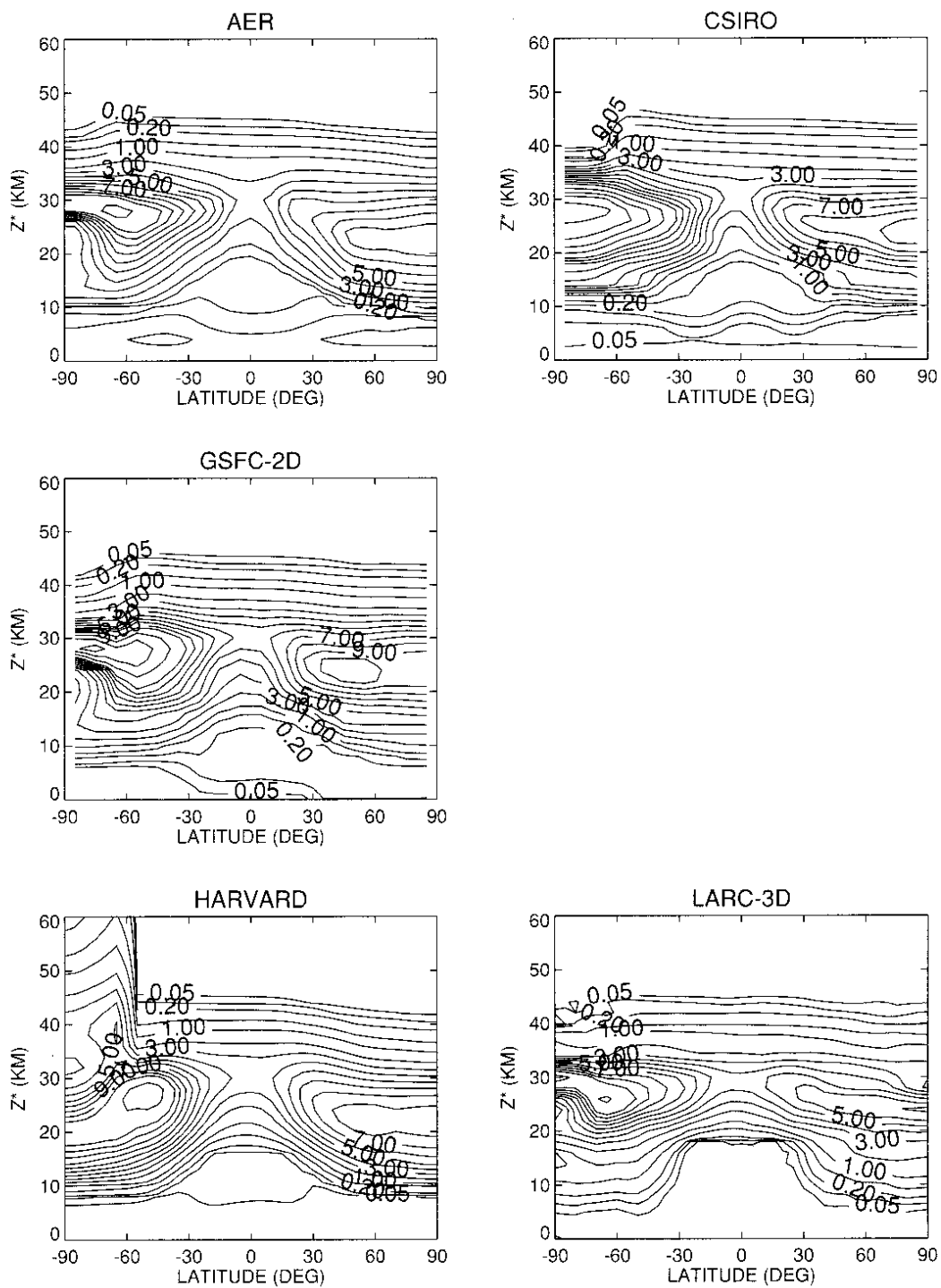


図 1.4-15 6月のHNO₃体積混合比の子午面分布の比較(続き)

(c) 他のモデル計算値(2)

B1. HNO₃ JUNE

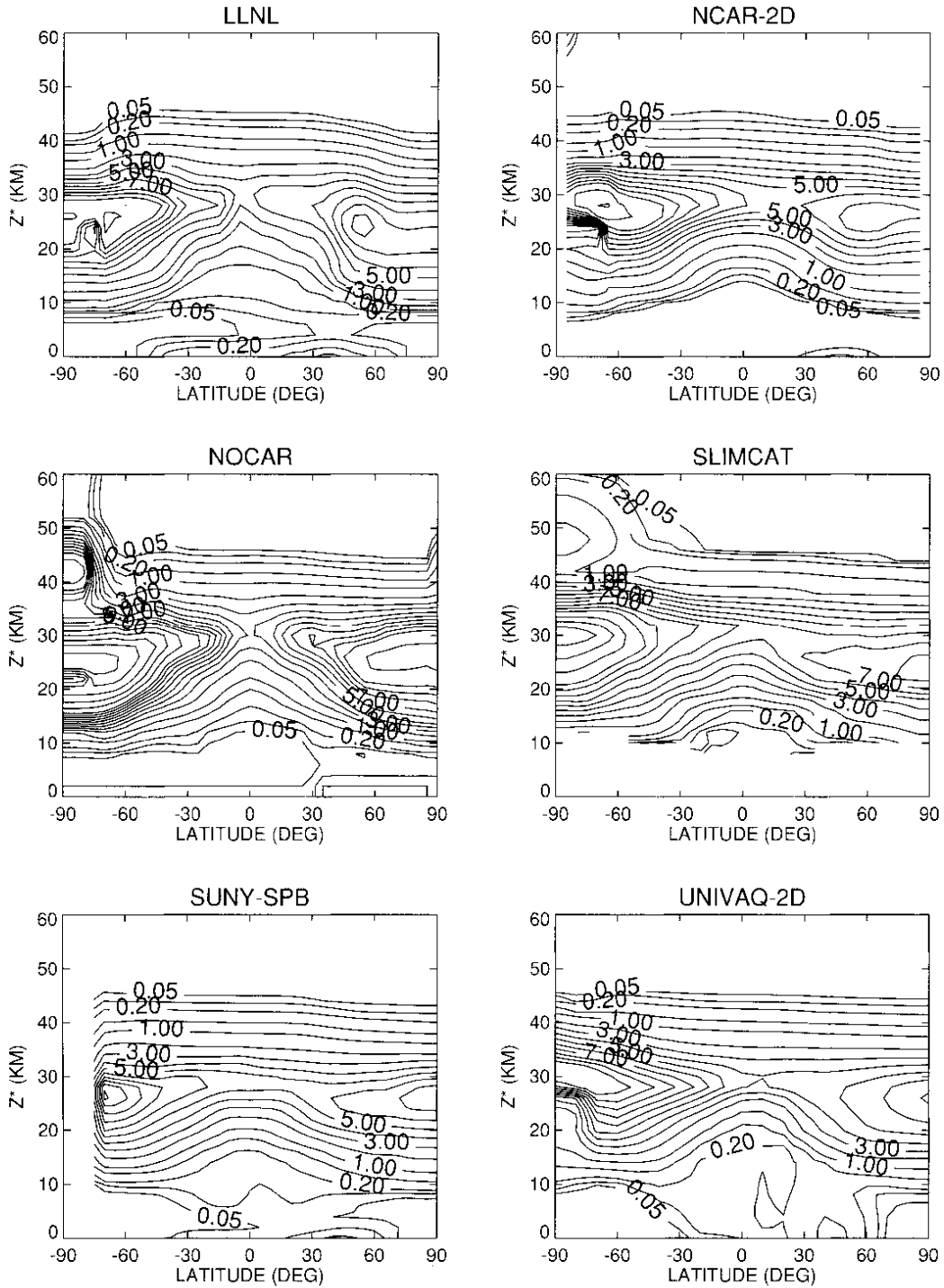


図 1.4-15 6月のHNO₃体積混合比の子午面分布の比較(続き)

(a) 本モデル計算値

HNO₃[ppbv], December 1994

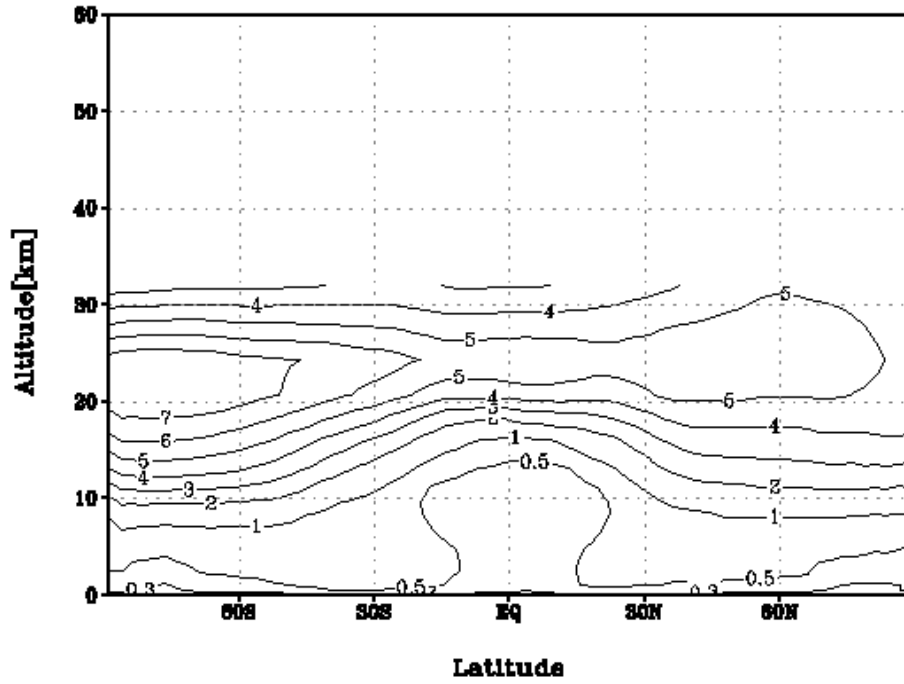


図 1.4-16 12月のHNO₃体積混合比の子午面分布の比較

(b) 他のモデル計算値(1)

B1. HNO₃ DECEMBER

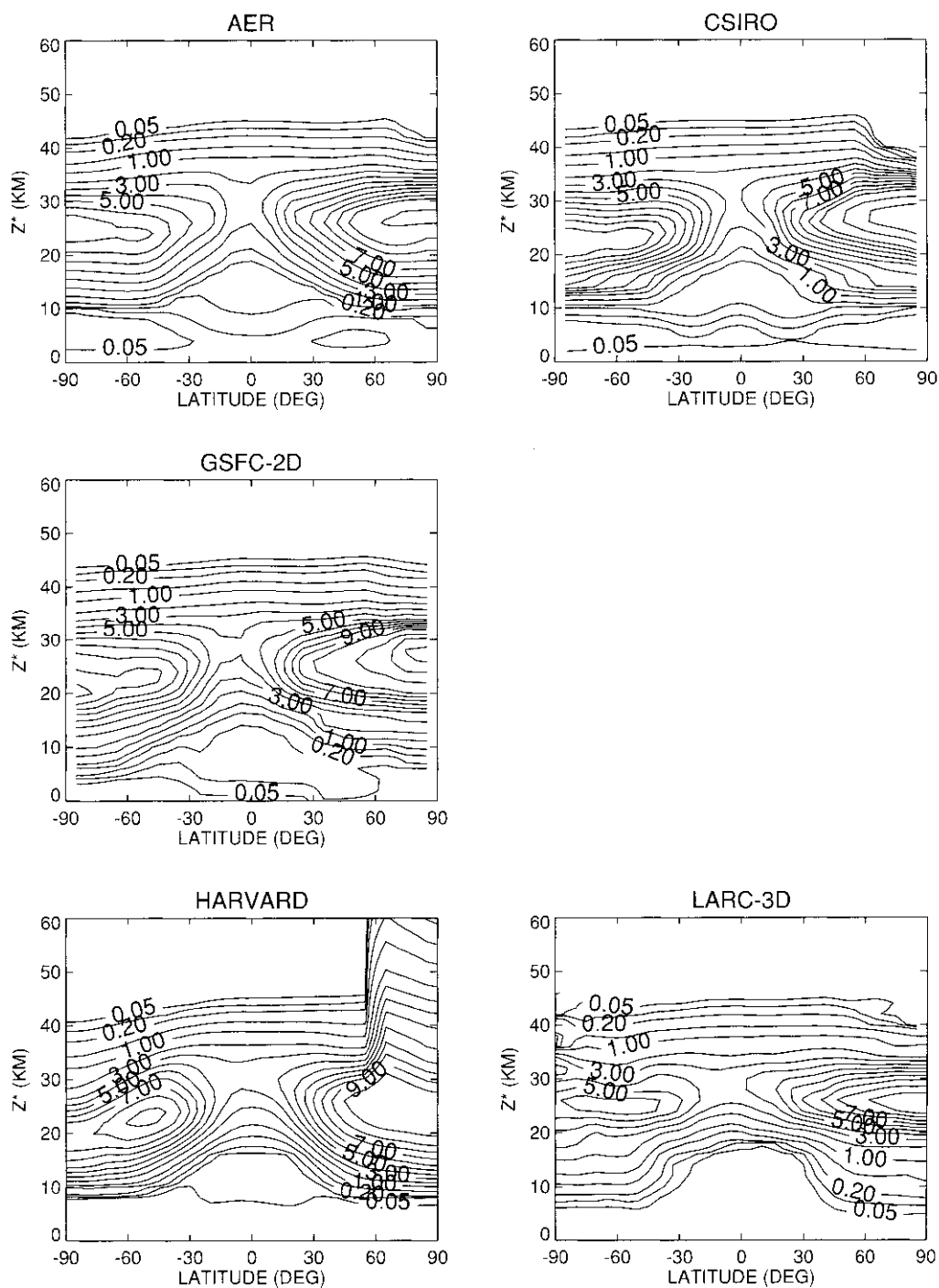


図 1.4-16 12月のHNO₃体積混合比の子午面分布の比較(続き)

(c) 他のモデル計算値(2)

B1. HNO₃ DECEMBER

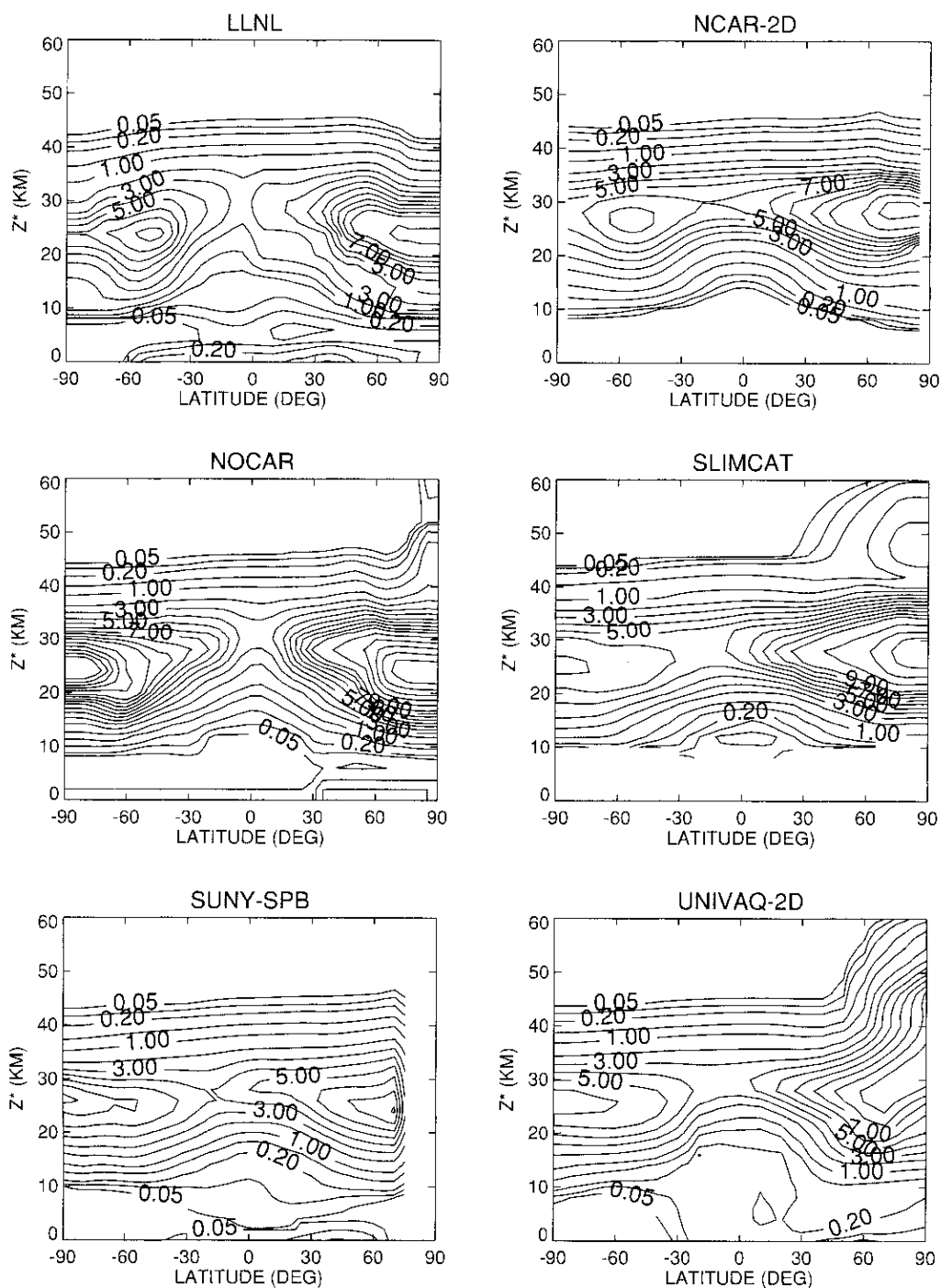


図 1.4-16 12月のHNO₃体積混合比の子午面分布の比較(続き)

(a) 本モデル計算値

CLY, JULY 1994

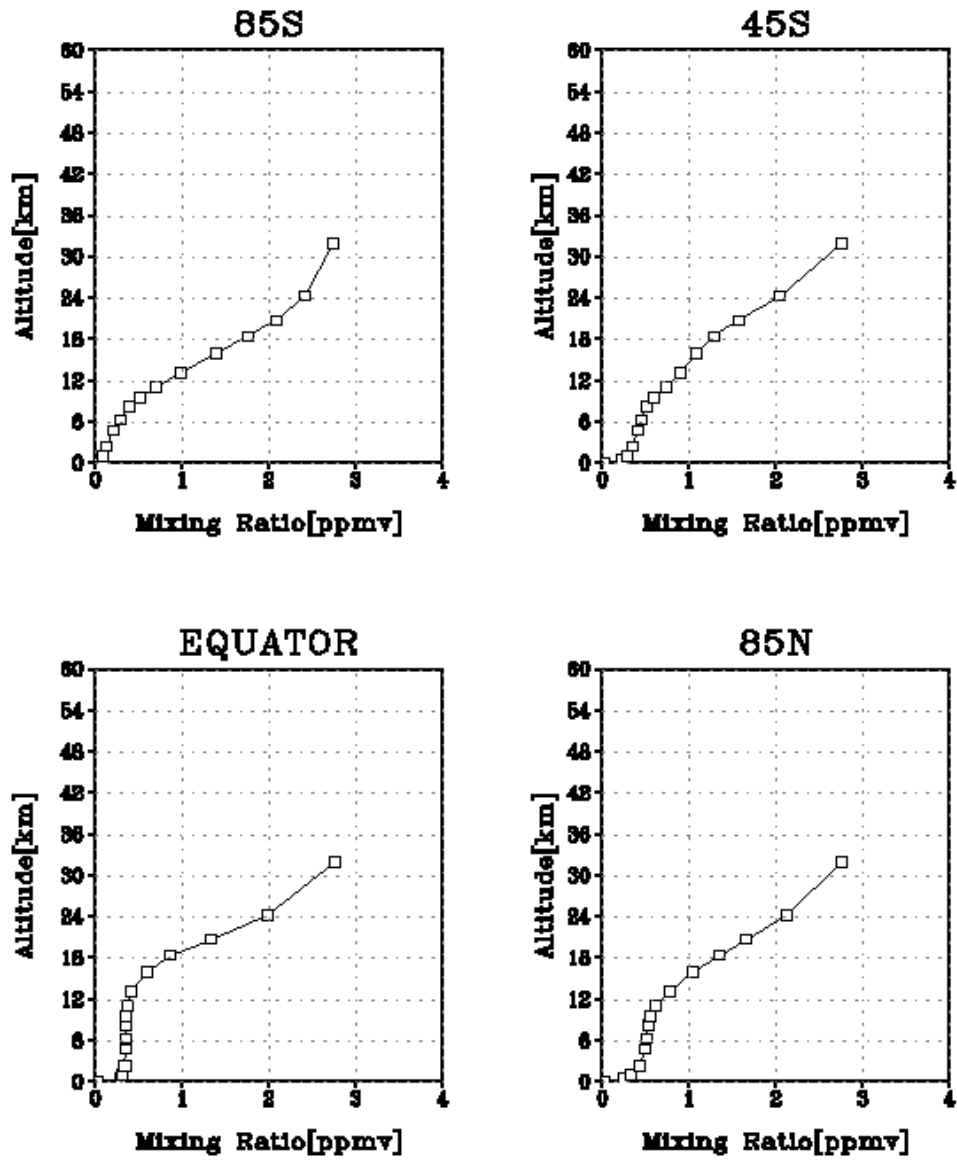


図 1.4-17 各緯度帯における Cly 体積混合比の高度分布の比較

(b) 他のモデル計算値(1)

B1. CLY JULY

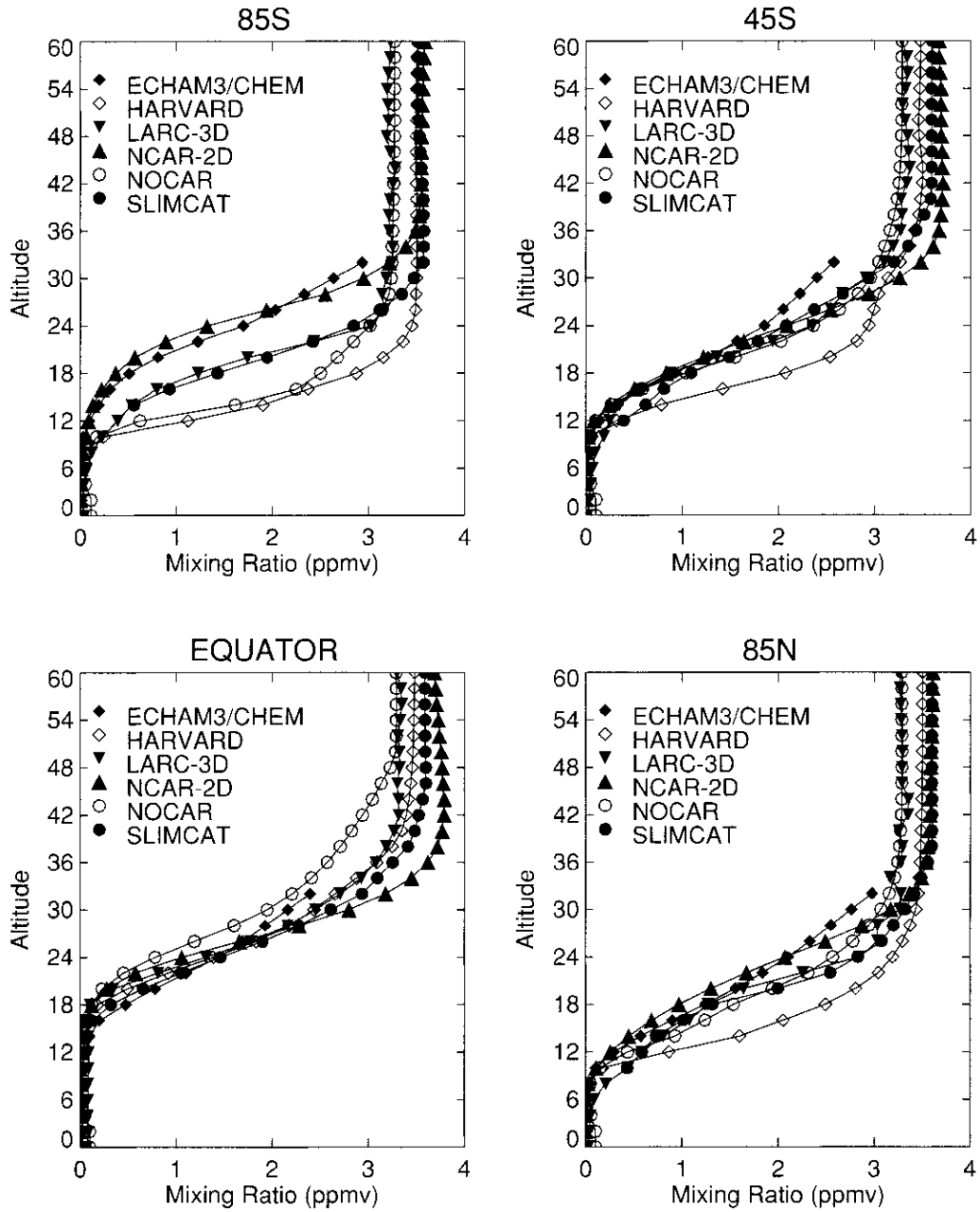


図 1.4-17 各緯度帯における Cly 体積混合比の高度分布の比較 (続き)

(c) 他のモデル計算値(2)

B1. CLY JULY

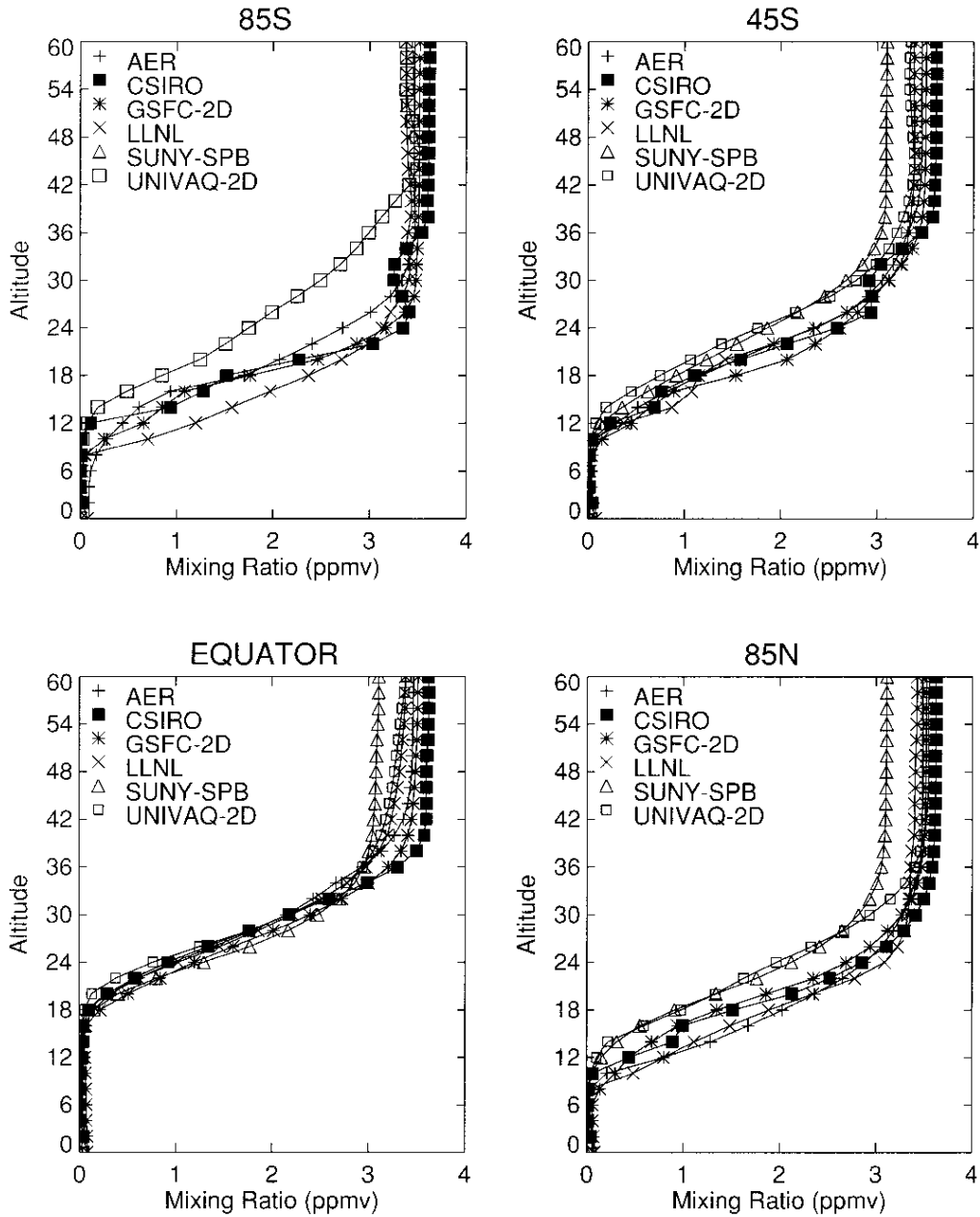


図 1.4-17 各緯度帯における Cly 体積混合比の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

ClONO₂[ppbv], June 1994

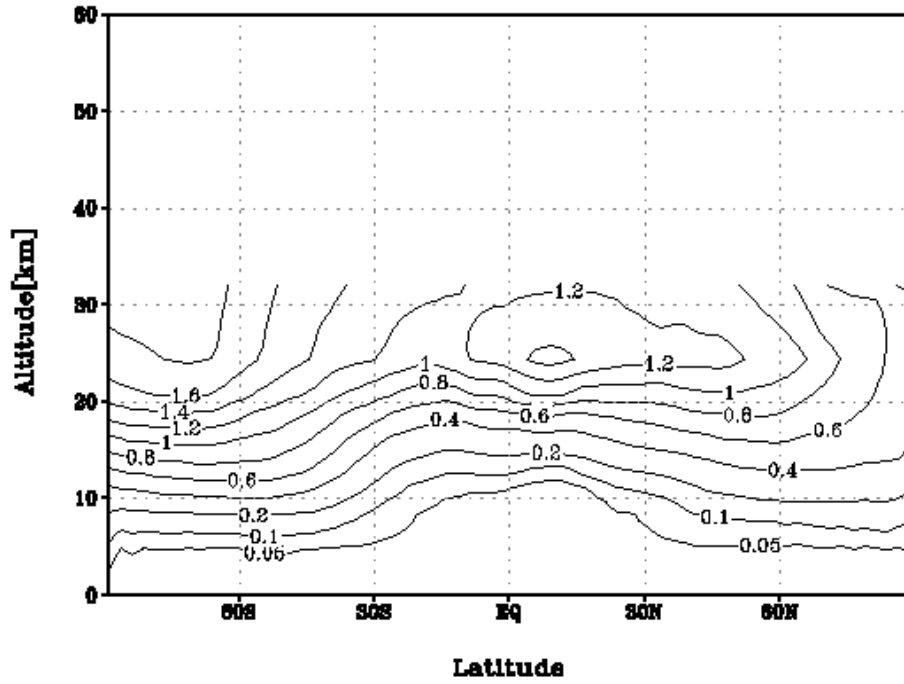


図 1.4-18 6月の ClONO₂体積混合比の子午面分布の比較

(b) 他のモデル計算値

B1. CLONO2 JUNE

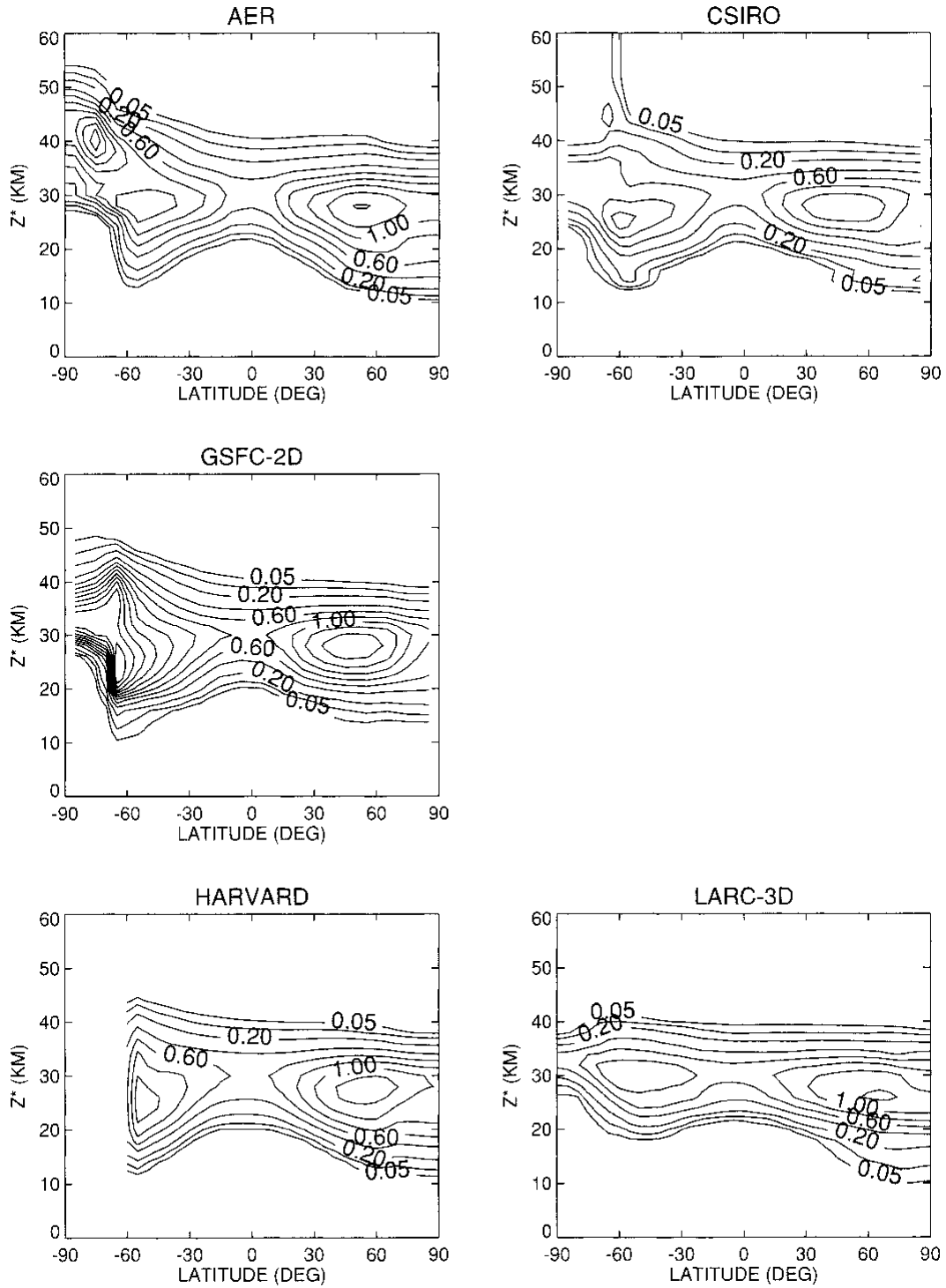


図 1.4-18 6月の CLONO2 体積混合比の子午面分布の比較 (続き)

(c) 他のモデル計算値(2)

B1. CLONO2 JUNE

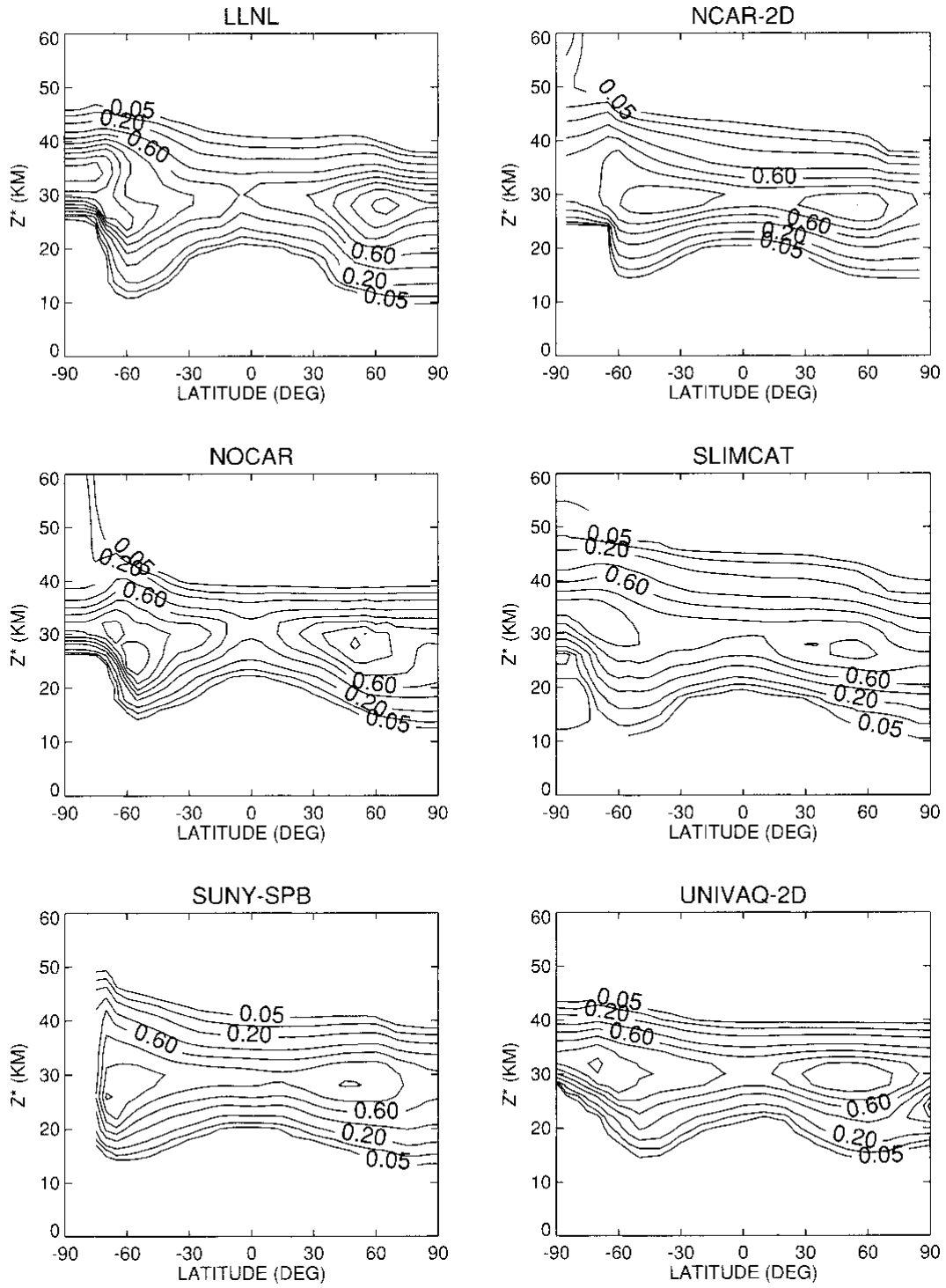


図 1.4-18 6月の ClONO2 体積混合比の子午面分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

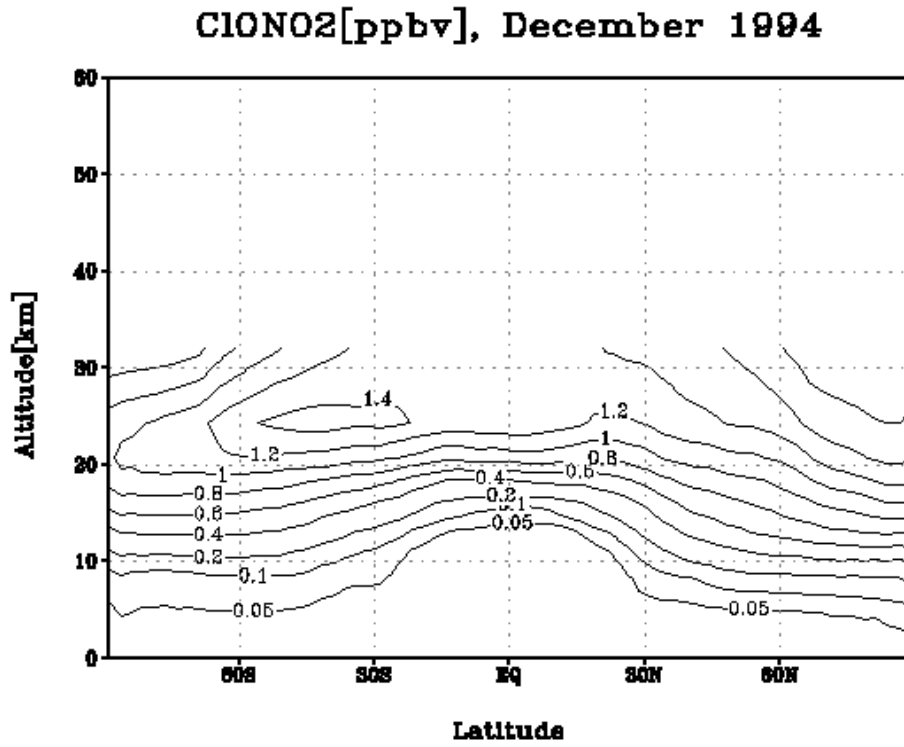


図 1.4-19 12月のClONO₂体積混合比の子午面分布の比較

(b) 他のモデル計算値(1)

B1. CLONO2 DECEMBER

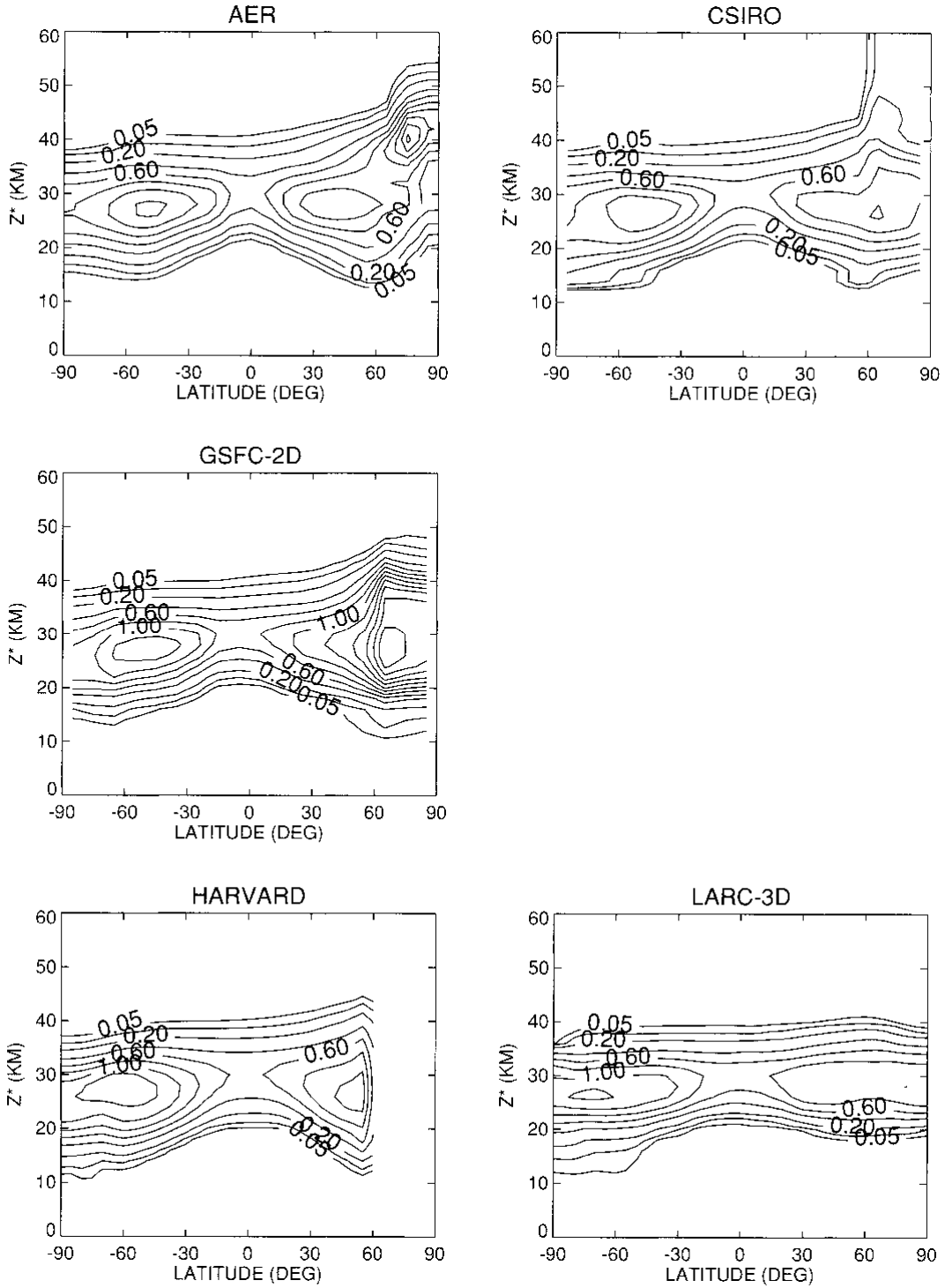


図 1.4-19 12月の ClONO₂ 体積混合比の子午面分布の比較 (続き)

(c) 他のモデル計算値(2)

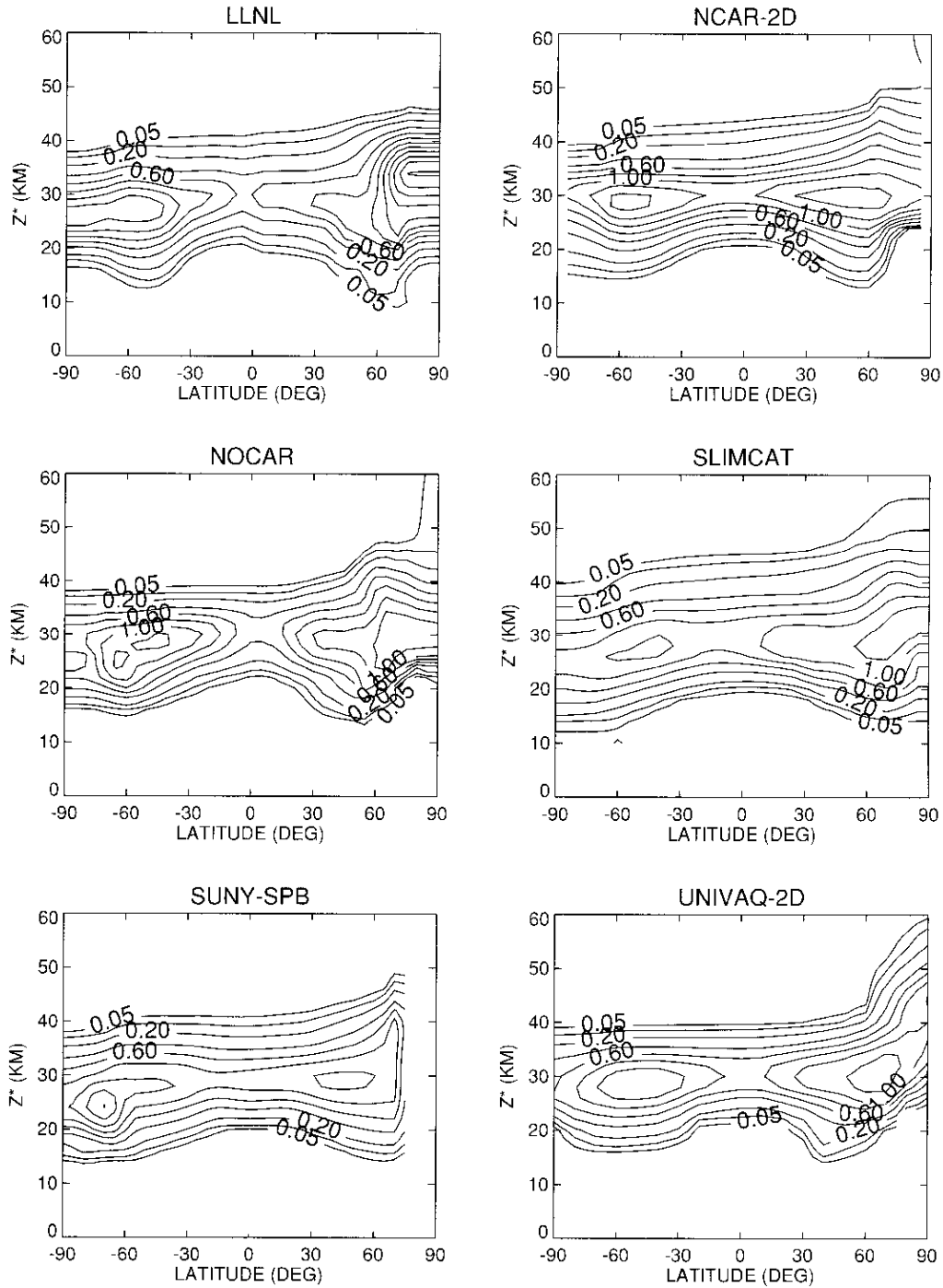


図 1.4-19 12月の ClONO₂ 体積混合比の子午面分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

HCl[ppbv], June 1994

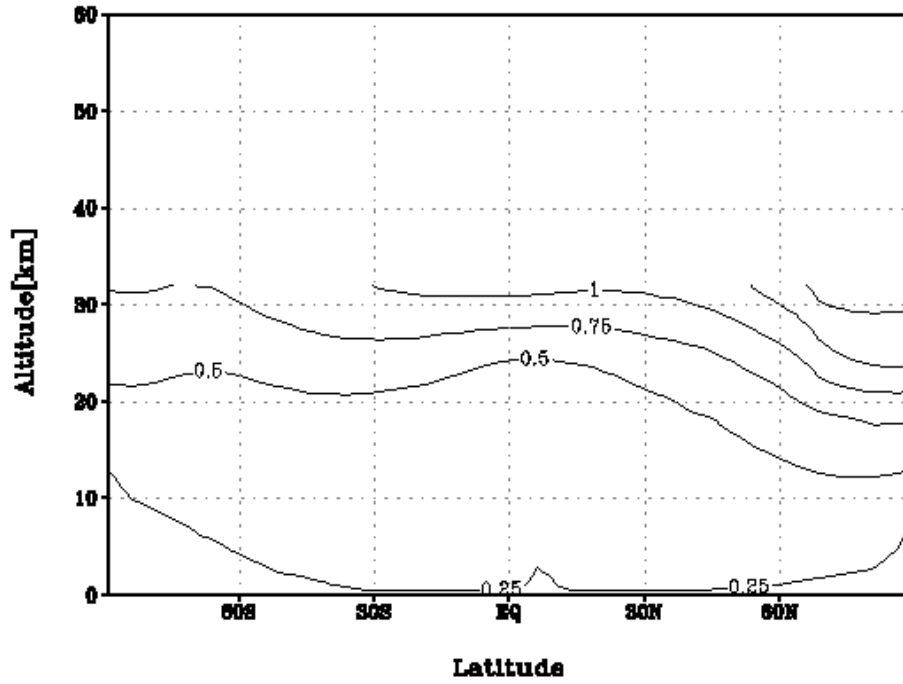


図 1.4-20 6月の HCl 体積混合比の子午面分布の比較

(b) 他のモデル計算値

B1. HCL JUNE

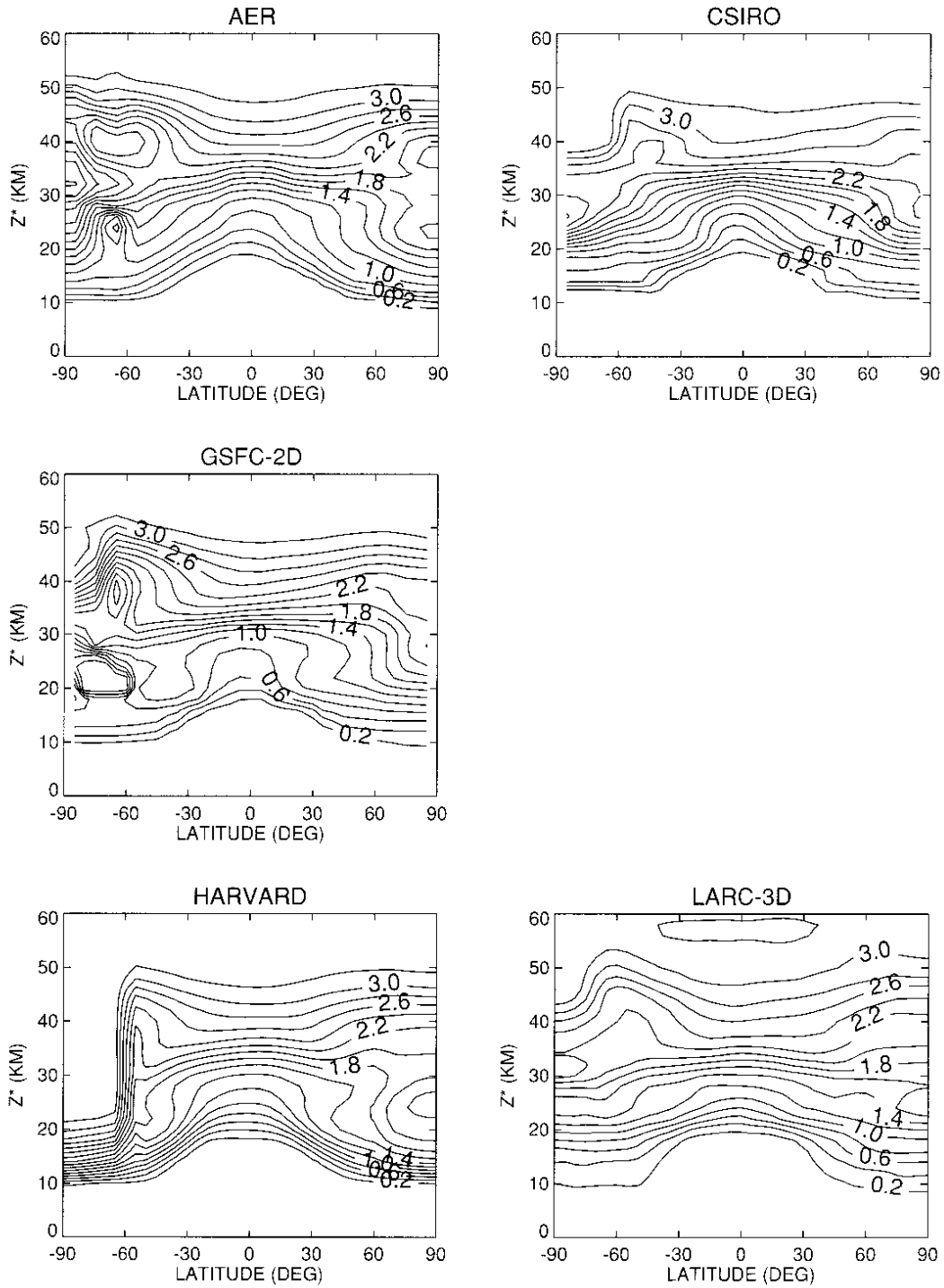


図 1.4-20 6月のHCl体積混合比の子午面分布の比較(続き)

(c) 他のモデル計算値(2)

B1. HCL JUNE

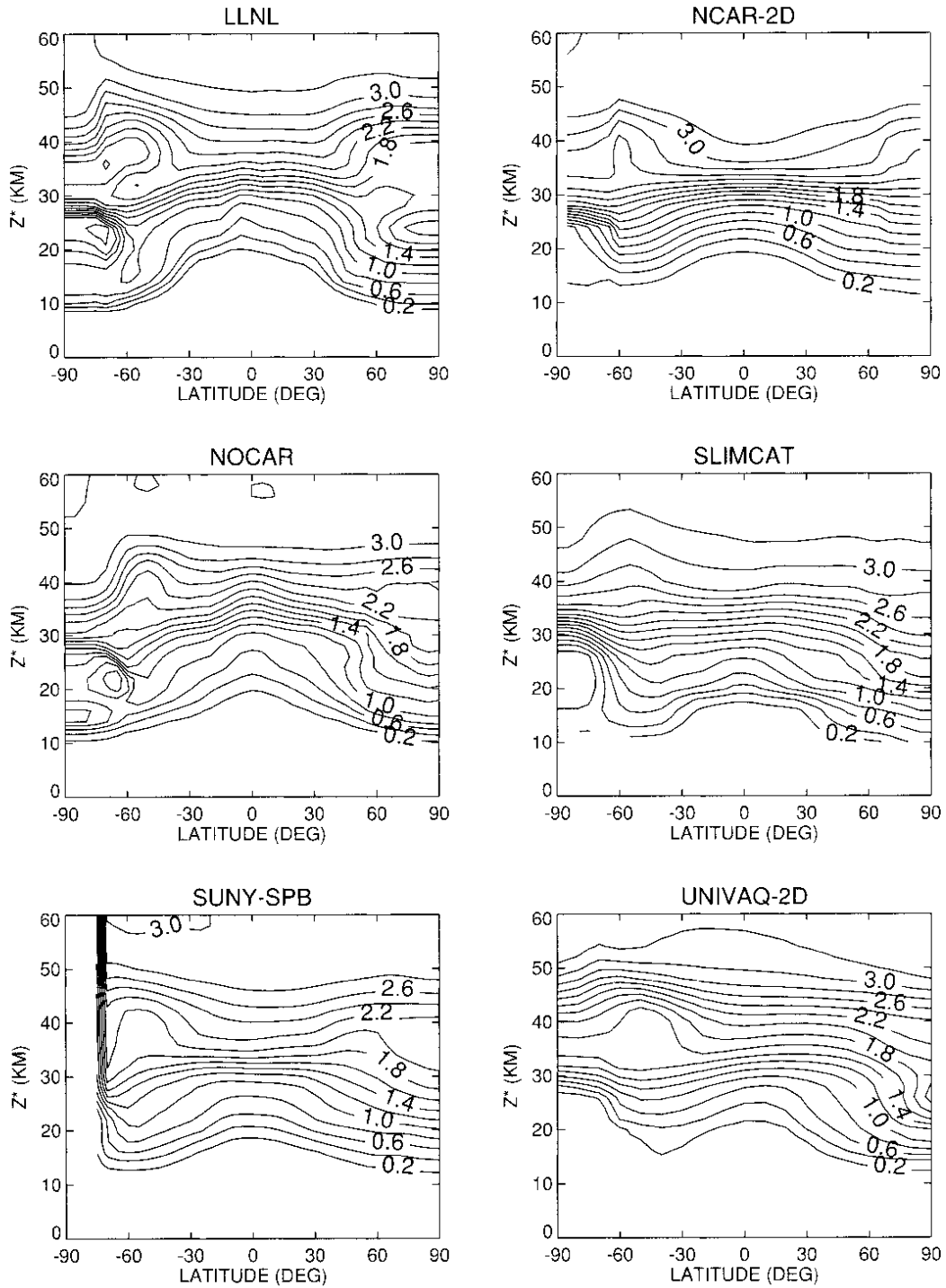


図 1.4-20 6月のHCl体積混合比の子午面分布の比較(続き)

(a) 本モデル計算値

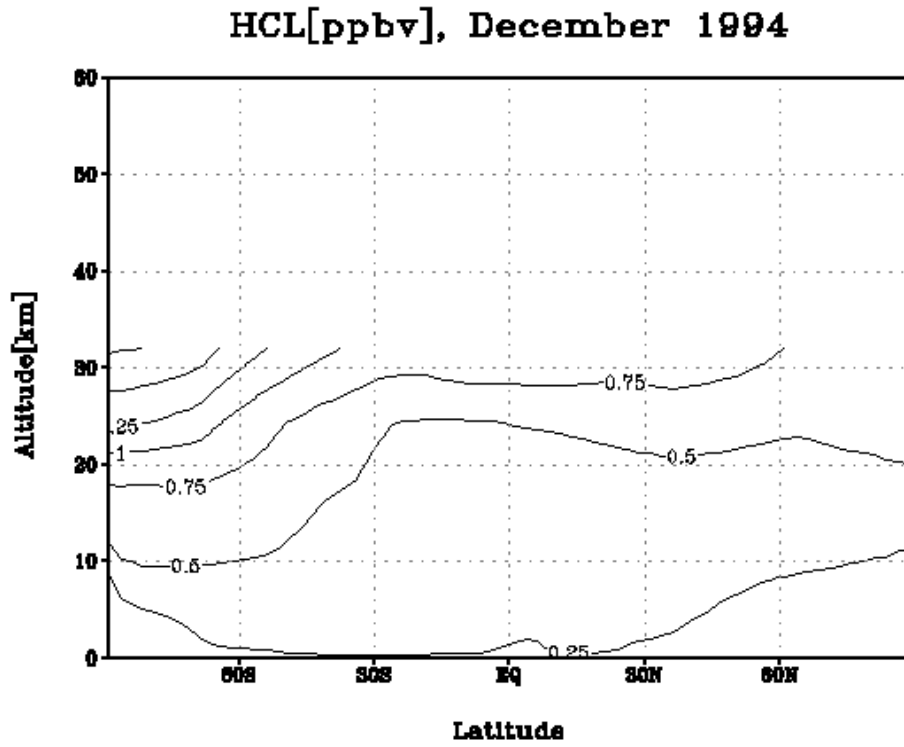


図 1.4-21 12月のHCl体積混合比の子午面分布の比較

(b) 他のモデル計算値(1)

B1. HCL DECEMBER

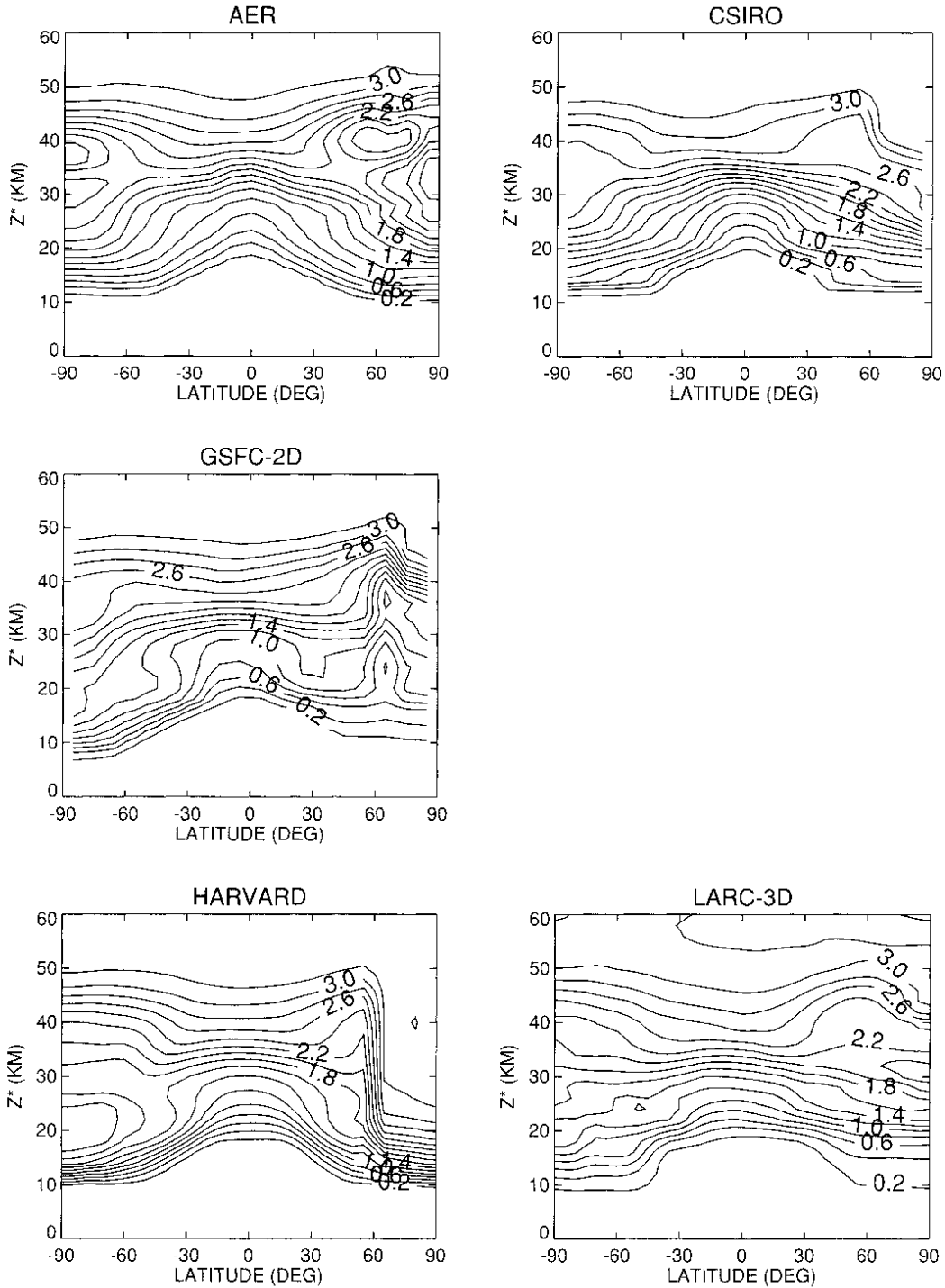


図 1.4-21 12月のHCl体積混合比の子午面分布の比較(続き)

(c) 他のモデル計算値(2)

B1. HCL DECEMBER

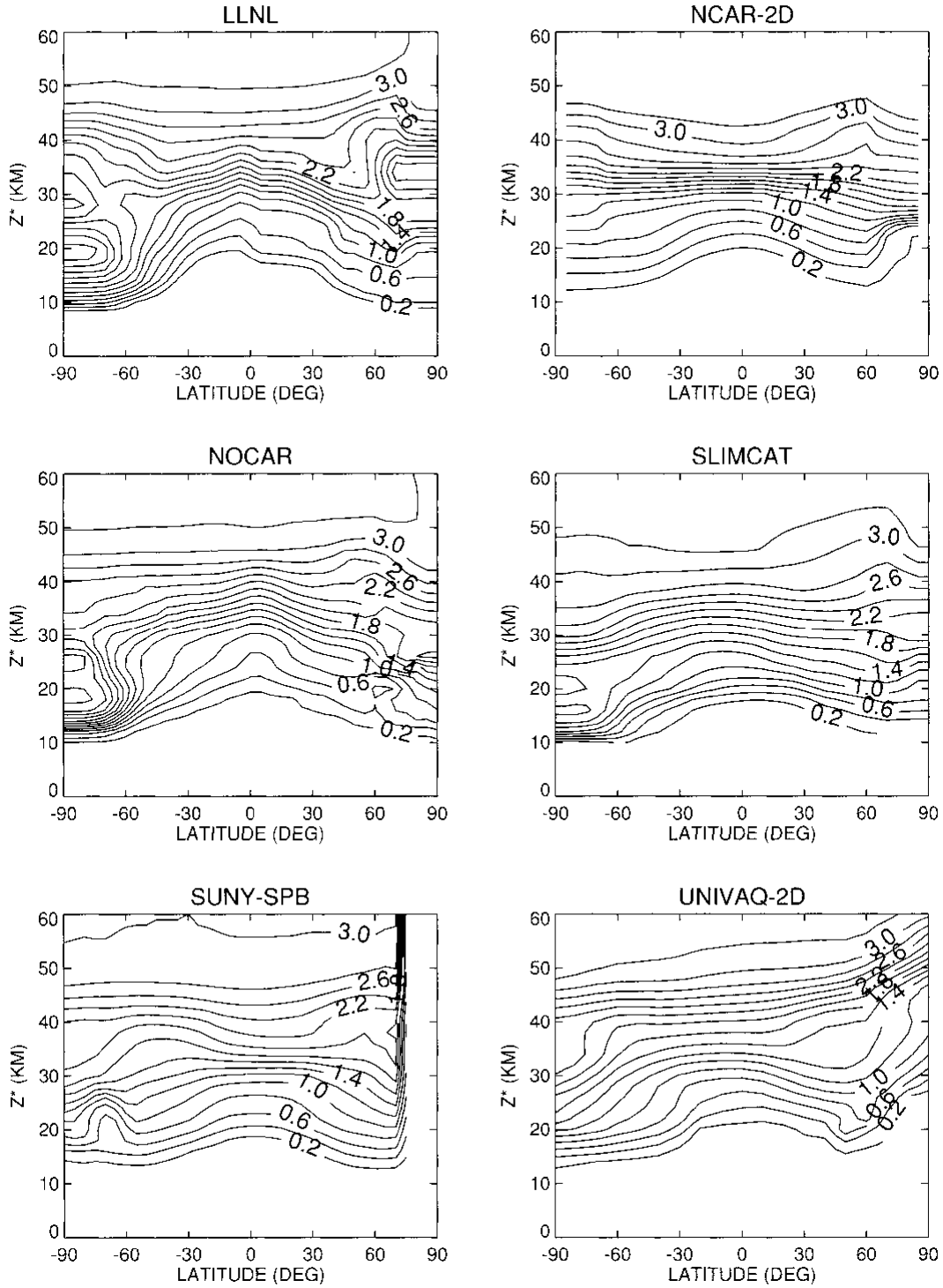


図 1.4-21 12月のHCl体積混合比の子午面分布の比較(続き)

1.5 海外調査の成果

(1) 調査目的

本スタディの一環として、米国国立大気研究センター等の研究機関を訪問し、化学輸送モデルの研究者と意見交換を行うことにより、高層大気研究に関する最新の国際動向や最先端技術の情報を収集する。

(2) 訪問先

米国国立大気研究センター

NCAR (National Center for Atmospheric Research) G. Brasseur 教授

NASA ラングレー研究センター

LaRC (Langley Research Center) M. Ko 博士

(3) 調査結果

1) Brasseur 教授との面談結果

- ①化学輸送モデル MOZART は、バージョン 2 からバージョン 3 およびバージョン 4 になった。これらは 2→3→4 と連続したバージョンではなく、特色の異なる別個のモデルである。
- ②このほか、NCAR の気候モデル CCSM (Community Climate System Model) に MOZART の化学モデルを組み込んで、気温や風などと化学物質の濃度を同時に計算させるオンライン・モデルの開発も行っている (これに対して化学輸送モデル単体で、気象データを外部から与えるものをオフライン・モデルと呼んでいた)。
- ③航空機の気候影響に関する研究は継続している。
- ④移流過程については、Lin and Rood のスキームがフラックス形式で定式化されており保存性もよい。また、気象解析データを用いる場合、鉛直風は誤差が大きく連続の式が成り立たないので、水平風速を元に連続の式を満たすような鉛直風速を求めた方がよい。
- ⑤化学輸送モデルの使い道としては、
 - 航空機のフィールド観測時の飛行プラン立案
 - 化学種の収支の研究
 - 化学物質の予報 (エアロソルや温室効果気体等) →局地的な予報の初期条件や境界条件として用いる
 - 100 年前から 100 年先までの大気状態の再現・予測
 - 船舶のエンジン排気の影響予測 (NO_x、CO、煤)
 - ハロゲン (臭素 Br、ヨウ素 I の化合物)

等があると考えている。

2) M. Ko 博士との面談結果

①ACCRI (Aviation Climate Change Research Initiative) は、NextGen (Next Generation Air Transport System) の一環として JPDO (Joint Planning and Development Office) と FAA が立ち上げた研究計画。NextGen は 2025 年までに航空需要が 3 倍になるという予測のもとに、空港や航空管制などのシステムをどのようにすればよいかを研究するもの。

②その一部として航空機の気候影響を研究する ACCRI があり、

- 上部対流圏・下部成層圏の化学と輸送
- 飛行機雲と巻雲：生成・微物理・ライフサイクル
- 飛行機雲と巻雲：光学特性と放射
- 気候への影響の分野について

科学的理解の現状と不確実性及びモデリング・解析の能力の現状を白書にまとめる。

③航空機の気候への影響については、現在のところ二酸化炭素の影響は 5%程度であるが、NO_x によるオゾン生成の影響が同程度あり、飛行機雲・巻雲の影響はよくわかっていない。さらに、上記のように航空機の需要増大が見込まれるため、影響は更に増えるだろう。

海外調査の結果、気象解析データの鉛直風の誤差の問題に対して、水平風速を元に連続の式を満たすような鉛直風速を求める方法を我々も適用し、本スタディの成果に反映させた。また、航空機の気候への影響評価において化学輸送モデルがなお重要であることや、今後の課題として気候モデルとの結合を目指していることなど、我々の今後の開発の方向性に反映させることができた。

第2章 境界値データベースの作成

3次元化学輸送モデルによる予測計算を行う際に必要となる、化学種ごとにどのような境界条件が適しているかを検討し、その境界値のデータを収集する。収集したデータは、前章で試作した3次元化学輸送モデルによる試計算を行う際に境界条件として用いる。

2.1 データ仕様

本スタディで試作する3次元化学輸送モデルで取り扱う化学種について、地表および大気上端における境界条件として、どれが適しているかを化学種ごとに検討した。

本スタディで試作する3次元化学輸送モデルでは、経度方向は周期境界条件（東経180°と西経180°は連続）、緯度方向には極付近の移流をセミラグランジュ法によって取り扱うので問題はないが、地表および大気上端における境界条件については、化学種ごとにどのような境界条件が適しているかを検討し設定する必要がある。境界条件としては以下のものが考えられる。

- 濃度の緯度・経度分布を指定
地表での観測値が十分に得られる化学種の場合、その観測値を面的な分布として与える。また、地表や大気上端で濃度がほとんど0になることがわかっている化学種について、0あるいは計算機で表現できる最小の正の値を設定する。
- 数密度フラックスの緯度・経度分布を指定
地表からの放出量がわかっている化学種の場合、その放出量を面的な分布として与える。また、大気上端での物質の出入りはないと仮定してフラックス=0を設定することもある。
- 沈着速度の緯度・経度分布を指定（地表のみ）
化学種によっては地表との接触によって消滅したり吸着されたりする（乾性沈着）ものがある。このような化学種では、沈着速度というパラメータを設定し、地表面から除去されるフラックスを求める。

各化学種の性質を考慮して検討した結果、大気上端および地表での境界条件を決定し、その仕様に基づいて境界値のデータを収集し、化学輸送モデルに入力できるよう整理した。

収集したデータ³⁾を表2.1-1に示す。これは1990年ごろにおけるバックグラウンド微量成分の地表における体積混合比の値である。

表 2.1-1 化学種ごとの境界値データ (参考文献 3)

化学種	地表境界条件	上端境界条件
O ₃	30ppbv	flux=0
N ₂ O	310ppbv	flux=0
NO _y	200pptv	flux=0
N ₂ O ₅	57pptv	flux=0
HO ₂ NO ₂	430pptv	flux=0
H ₂ O	3.0ppmv	flux=0
H ₂ O ₂	520pptv	flux=0
H ₂	0.5ppmv	flux=0
CH ₄	1.6ppmv	flux=0
CH ₃ O ₂	20pptv	flux=0
CH ₂ O	30pptv	flux=0
CO	100ppbv	flux=0
CO ₂	345ppmv	flux=0
CH ₃ Cl	600pptv	flux=0
CCl ₄	105pptv	flux=0
CFCl ₃	275pptv	flux=0
CF ₂ Cl ₂	468pptv	flux=0
CH ₃ CCl ₃	150pptv	flux=0
Cly	20pptv	flux=0
CH ₃ Br	1.5pptv	flux=0

2.2 収集したデータ

前節に記した境界値データのほか、MOZARTの入力データの中に、いくつかの化学種の地表からのフラックスがまとめられていた。参考のため、これらを図化したものを図 2.2-1～図 2.2-5 に示す。

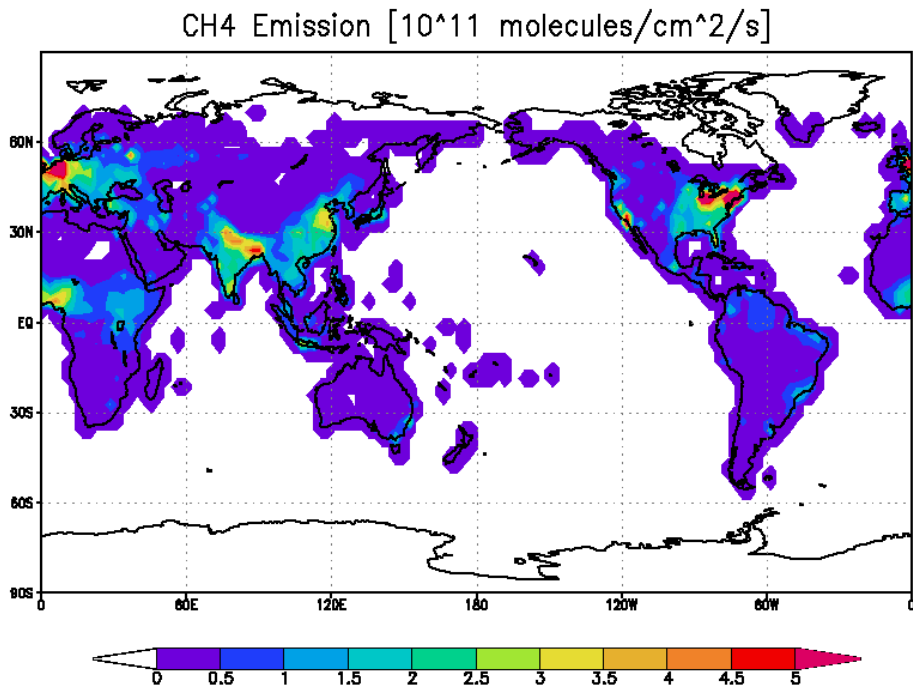


図 2.2-1 メタンの排出フラックスデータ

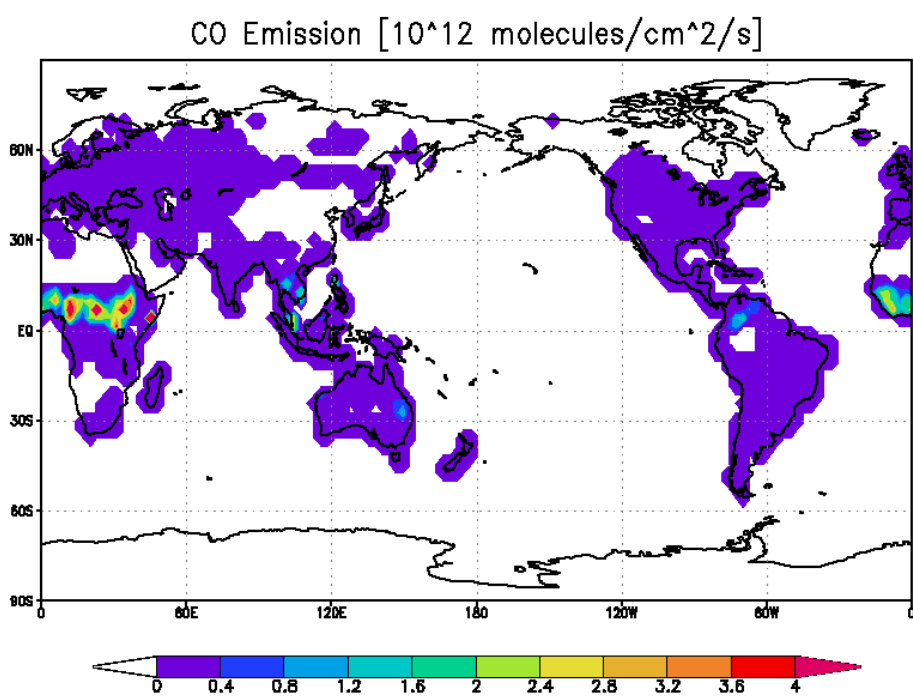


図 2.2-2 一酸化炭素の排出フラックスデータ

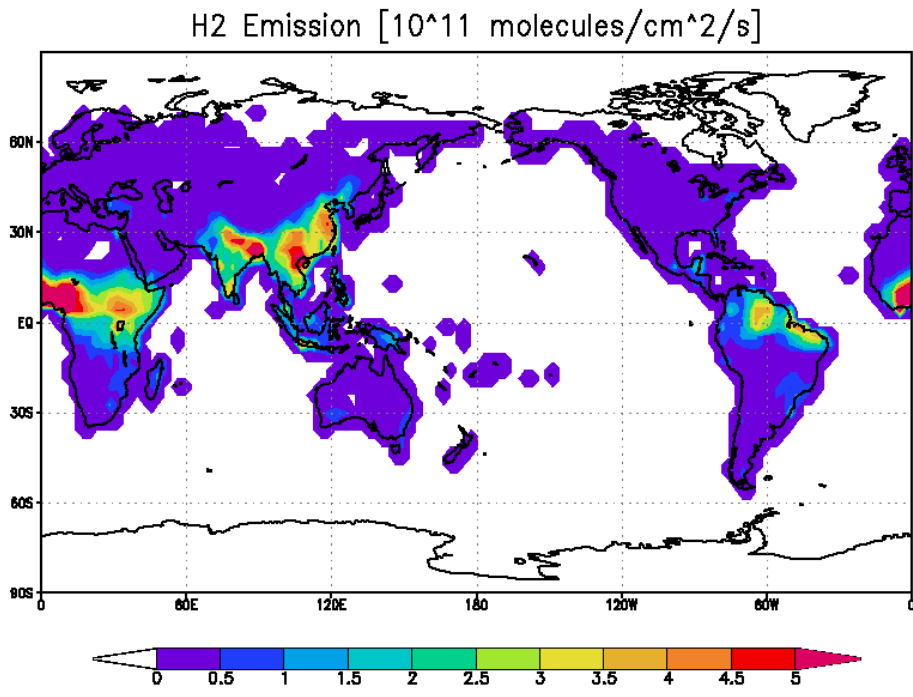


図 2.2-3 水素の排出フラックスデータ

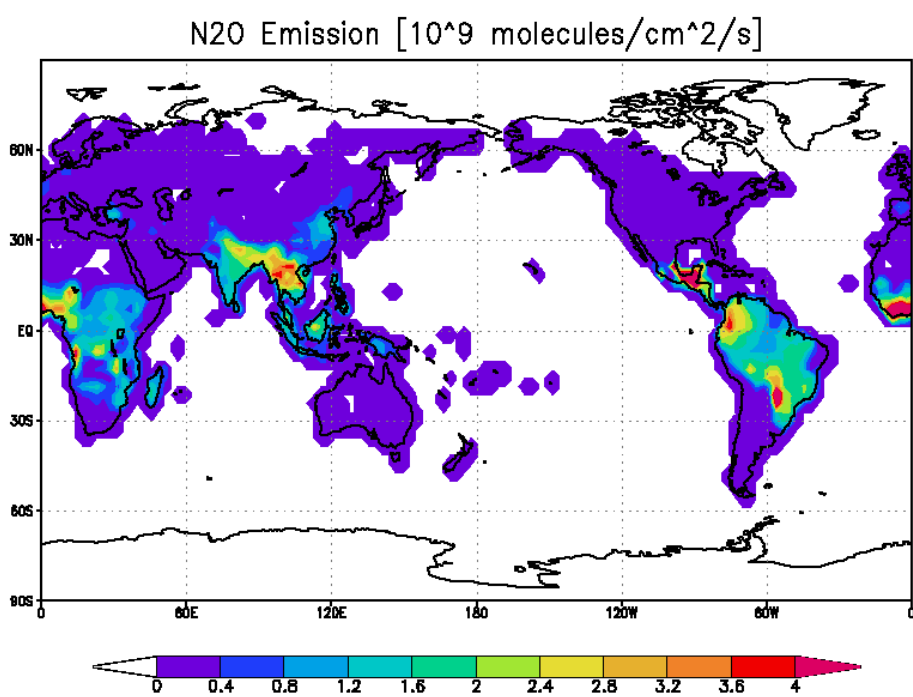


図 2.2-4 N₂O の排出フラックスデータ

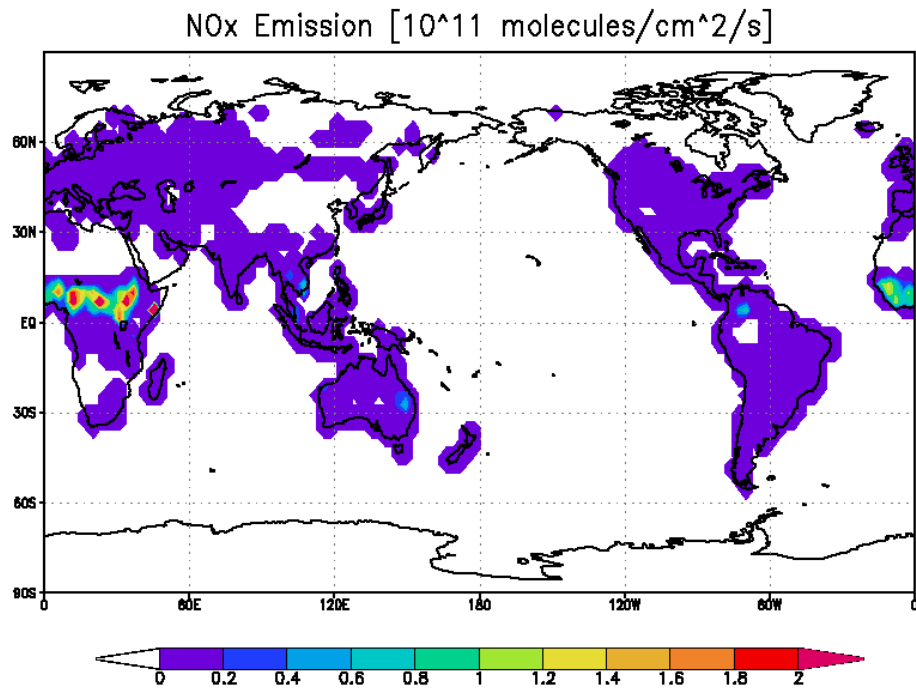


図 2.2-5 NO_x の排出フラックスデータ

4 スタディの成果

スタディ結果の概要

航空機は高度 8km 以上の上部対流圏から下部成層圏を飛行するため、そのエンジン排気は対流圏及び成層圏の両方に拡散する可能性がある。航空機のエンジン排気には、二酸化炭素が含まれており、地球温暖化に影響している。また、エンジン排気に含まれる窒素酸化物 (NO_x) は、大気中の光化学反応によってオゾン濃度を変化 (対流圏では主にオゾンを生じ、成層圏ではオゾンを破壊) させたり、間接的にメタン分解を促進したりすることによって、やはり温暖化に影響を与える可能性がある。

このような、航空機が地球温暖化に及ぼす影響については、ICAO (国際民間航空機関) の要請に基づいて気候変動に関する政府間パネル (IPCC) が特別報告書「航空機と地球大気」を 1999 年に取りまとめた。この報告書では、いくつかのシナリオの下で、2050 年までの航空機による潜在的な気候への影響について評価を行った。その結果、二酸化炭素などの排出による影響はかなりよく定量化され理解が進んできている一方で、大気中で起る化学反応群と輸送過程に関する不確実性のために、大気成分に関する理解が精度的に不十分であり、さらなる作業が必要と結論づけられた部分もある。その一つとして、航空機の排出する NO_x がオゾンやメタンの濃度変化に果たす役割が挙げられている。

大気中の物質の濃度は、基本的には適切な化学輸送モデル (CTM: Chemical Transport Model) を用いることによって予測することができる。そこで、航空機の排出物に含まれる NO_x が、大気中のオゾンやメタンの分布に及ぼす影響を定量的に予測するための化学輸送モデルに関する調査研究を実施した。

平成 14 年度から平成 17 年度にかけての調査研究の結果、航空機エンジン排気によるオゾン等の温室効果気体への影響を予測するための 3 次元化学輸送モデルが満たすべき仕様が、その一連の手順を含めて明確になり、実際のモデル開発に着手することが可能となった。

一方、航空機排出物の環境影響を予測するためには、既存の 3 次元化学輸送モデルでは、高度領域や対象化学種、あるいはモデル内で扱うプロセスに関して不十分であることが明らかになった。

化学輸送モデルでは、約 50 種類の化学種の濃度を計算するため、太陽放射による光解離や、気体成分どうしの気相反応、エアロソルと呼ばれる固体もしくは液体の微粒子の表面で起きる異相反応等、全部で 100 種類以上の反応を扱うことになる。

このような複雑な数値モデル全体をまとめて一気に開発することは大きなリスクを伴う。このリスクを軽減するため、風による物質の移動を模擬する物質輸送モデルの部分と、太陽放射による光解離や化学反応を模擬する化学反応モデルの部分のそれぞれを試作し、問

題がないか確認しながら、段階的に開発を進めることが必要であると判断された。

初年度の平成 18 年度には、この 3 次元化学輸送モデルの一部である物質輸送モデルを試作し、その計算速度や精度について実証した。

以上を踏まえ、2 年目となる本フィージビリティスタディでは、この物質輸送モデルに化学反応を組み込んで化学輸送モデルの試作品を作成し、オゾン等の濃度分布の計算結果が実際の観測値とどの程度一致するかを実証することとした。

図 4,1-1 に各年度の研究項目の位置付けを示す。

平成 19 年度は、次のスタディを行った。

(1) 物質輸送モデルの試作

平成 18 年度に開発した 3 次元物質輸送モデルに化学反応を組み込み、3 次元化学輸送モデルの試作品を海外の最新情報を取り込みつつ作成する。この 3 次元化学輸送モデルは、化学種の連続の式（化学反応による生成・消滅項を含む）を数値的に時間積分し、対象化学種の数密度の緯度・経度・高度の 3 次元分布を求めるものである。

まず、開発にあたっての課題を抽出し優先順位を検討して、今年度の作業実施計画を策定し、今年度開発するプロトタイプと本格開発時の 3 次元化学輸送モデルの位置付けを修正した。計算対象とする化学種や化学反応を決定し、化学反応速度係数などのデータを収集して、今年度開発する 3 次元化学輸送モデルのプロトタイプの仕様書を取りまとめた。

対象領域は、3 次元物質輸送モデルと同様、

緯度：北極～南極

経度：西経 180° ～東経 180°

高度：地表～10hPa 面（約 30km）

とし、水平（緯度・経度）解像度は 2.5°、鉛直解像度は約 2km とした。

化学種の種類は 93 種、化学反応 80 種程度を想定し、化学反応には気相反応のほか、光解離や異相反応など全部で 230 種を選定した。

作業計画及び仕様書にしたがって 3 次元化学輸送モデルの開発を行った。入力する気象データとしては、欧州中期気象予報センター（ECMWF）の全球解析データを使用することとし、物質輸送の計算にはセミラグランジュ法的一种であるキュービック・ラグランジュ（CUL）法を用いた。CUL 法で発生する振動に対しては、人工的な数値粘性を付加することで、抑えられることがわかった。

作成した 3 次元化学輸送モデルのプロトタイプを用いて、22 ヶ月間の計算を実施し、その計算速度が要求仕様の範囲内に収まっていることを確認した。また、オゾン等の化学種の濃度分布の計算結果を NASA の「モデルと観測ワークショップ II」の報告書にまとめられている観測値や他のモデルの計算値と比較し、十分によく一致することを検証した。

(2) 境界条件選択機能の試作

3次元化学輸送モデルによる化学物質濃度の予測を行う場合、境界条件を設定しなければならない。本スタディで試作する全球モデルでは、経度方向は周期境界条件（東経 180° と西経 180° は連続）、緯度方向にはフラックスが 0（90° を超える緯度は存在しない）とすればよいが、地表および大気上端における境界条件については、化学種ごとにどのような境界条件が適しているかを検討し設定する必要がある。

そこで、前項で試作する 3次元化学輸送モデルで取り扱う各化学種について、地表および大気上端における境界条件として、以下のうちどの境界条件が適しているかを化学種ごとに検討し境界値データベースの仕様を作成した。

- 濃度の緯度・経度分布を指定
- 数密度フラックスの緯度・経度分布を指定
- 沈着速度の緯度・経度分布を指定（地表のみ）

さらに、3次元化学輸送モデルで取り扱う化学種ごとの境界値のデータを収集・整理し、化学輸送モデルによる検証計算のための入力値として使用した。

以上のスタディの結果、大気成分の濃度について全球スケールでシミュレーションできるモデルの基礎的な部分が完成した。検証の結果は他のモデルと比べて遜色なく、観測値ともよい一致を示している。この結果、航空機のエンジン排気だけに限らず、大気中に放出され長距離輸送される化学物質（例えば酸性雨原因物質や残留性有機汚染物質）の反応を含めた拡散予測や影響評価に利用できると考えられる。

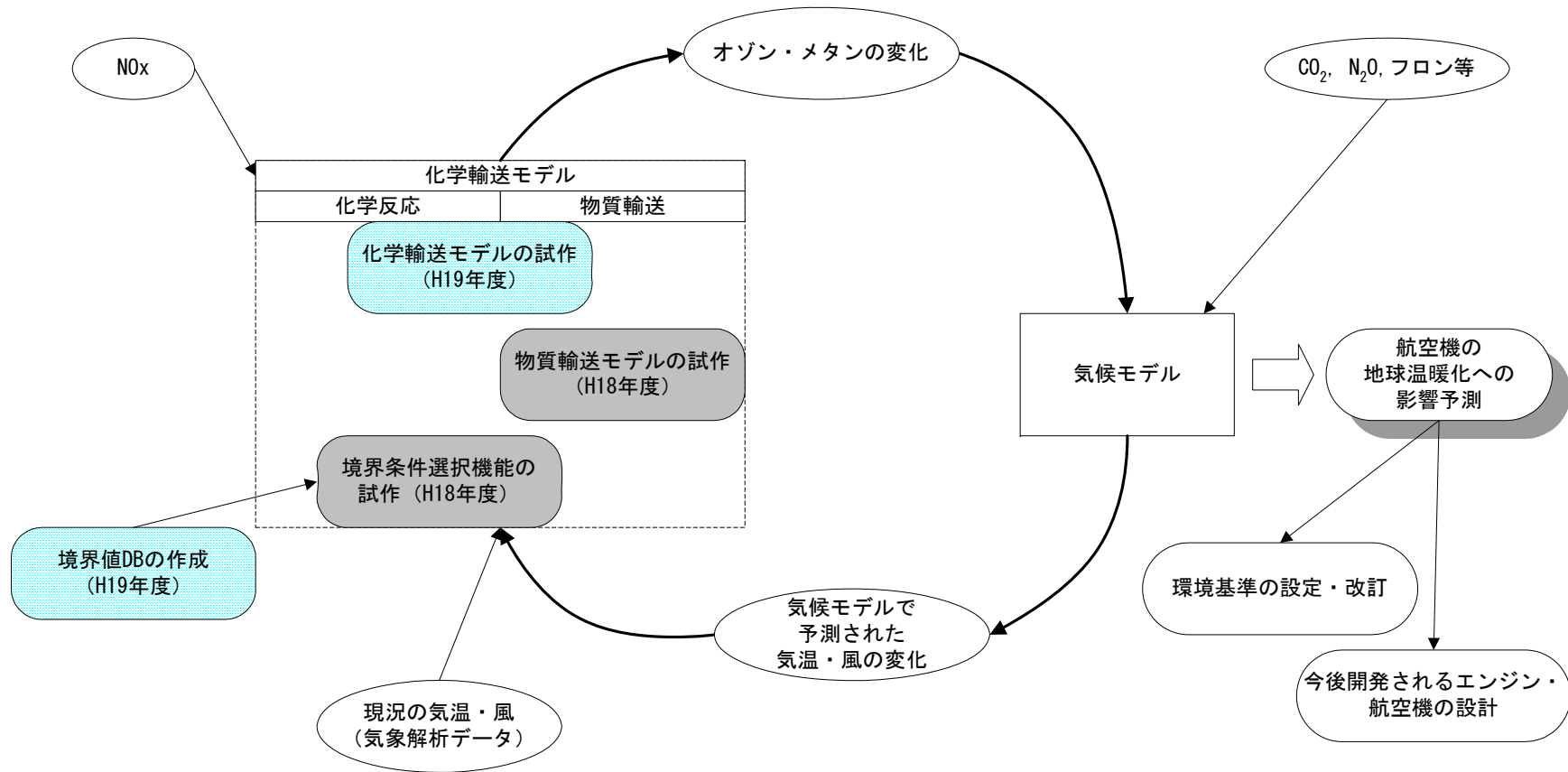


図 4.1-1 化学輸送モデル開発に関するフィージビリティスタディの位置付け

5 スタディの今後の課題および展開

2年間にわたる本スタディは、航空機エンジン排気による地球温暖化への影響予測のために、オゾン等の温室効果気体への変動を予測する3次元化学輸送モデルのプロトタイプを作成することによって完了した。しかし、所期の目的から見れば、なお、いくつかの課題が残されている。以下に短期的・中長期的課題を挙げ、今後期すべき展開の方向を示唆しておく。

(1) 短期的課題

この化学輸送モデルに対し、積雲対流による鉛直輸送や成層圏・対流圏間の物質交換、雲や雨水に溶解することによる除去（湿性沈着）など、微量成分の分布に影響を与える過程を組み込み、モデルの精度を向上させることが必要である。

さらに、オゾン層への影響評価を行うためには、モデルの上端を50km程度まで引き上げ、オゾン層全体のシミュレートができるようにしておく必要がある。

一方、より高速な計算ができるようになるためには、並列計算機の技術動向を見据えつつ、分散メモリ型への移行を行っていく必要がある。

これらの作業と併せ、航空機エンジン排気によるオゾン等の温室効果気体の変動予測などの計算を実施し、国内外に向けて成果を発信していくことが不可欠である。

(2) 中長期的課題と今後の展開

本スタディの究極の目的は、民間航空機の開発・生産において、今後我が国が国際共同事業における主体的立場を確保し、戦略的産業である航空機産業の振興、ひいては機械システムの振興に資することにある。そのためには海外及び国内の動向調査などの情報収集を行うことがその活動の基本である。その一方で、航空機の技術開発とともに、航空機が地球温暖化に及ぼす影響を予測する世界と対等以上の技術を保有することが必要である。

これらを念頭に置くと、今後の中長期的課題は以下のとおりである。

- 本スタディで仕様が決定された3次元化学輸送モデルによる予測計算を実施するためには、高速な計算機による大規模計算が不可欠である。そのためには、地球シミュレータ、地球フロンティア等との協力体制を築く必要がある。
- また、今後はさらに気候-化学フィードバック過程を直接的に考慮できるオンライン・モデルの開発へと進む見通しである。海外の動向を常に注視し、それと同等以上のモデルを持つことで、世界におけるわが国の主導的な貢献を果たすことができる。

参考資料-1 参考文献

- 1) J. H. Park, M. K. W. Ko, C. H. Jackman, R. A. Plumb, J. A. Kaye and K. H. Sage: “Models and Measurements Intercomparison II”, NASA/TM-1999-209554, National Aeronautics and Space Administration, Langley Research Center, Hampton, VA, USA, 502 pp. (1999)
- 2) W. B. DeMore, S. P. Sander, D. M. Golden, R. F. Hampson, M. J. Kurylo, C. J. Howard, A. R. Ravishankara, C. E. Kolb and M. J. Molina: “Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling Evaluation Number 12”, NASA JPL Publication 97-4, National Aeronautics and Space Administration, Jet Propulsion Laboratory, and California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA, (1997)
- 3) WMO/UNEP, “Scientific Assessment of Stratospheric Ozone: 1989”, WMO Global Ozone Research and Monitoring Project Report No.20 (1990)

参考資料-2 用語集

異相反応 (heterogeneous reaction)

空気中に浮かぶ固体または液体との化学反応。

エアロソル (aerosol)

大気中に浮遊する固体または液体の微粒子。

気相反応 (gas phase reaction)

気体の化合物どうしの化学反応。

光解離 (photodissociation)

太陽光線 (主として紫外線) による化学反応。

AEAP (Atmospheric Effects of Aviation Program)

「航空機の大気影響」。1995年～2001年に実施された、NASAの航空機環境影響研究プロジェクト。

AER (Atmospheric Environmental Research)

アトモスフェリック・エンバイロメンタル・リサーチ社 (米国)

AESA (Atmospheric Effects of Stratospheric Aircraft)

「成層圏航空機の大気影響」。1990年～2001年に (1995年以降はAEAPの一部として) 実施されたNASAの超音速航空機の環境影響研究プロジェクト。

CAEP (Committee on Aviation Environmental Protection)

航空機環境保全委員会

CLAES (Cryogenic Limb Array Etalon Spectrometer)

UARS 搭載センサー。HNO₃、ClONO₂、CH₄、N₂O、O₃、CFCl₃、CF₂Cl₂、H₂O、温度、エアロソル、NO、NO₂、NO₂、N₂O₅等を全球規模で計測。

Climatology

気候値。概ね10年程度以上の期間についての平均値。

CONTRAIL (Comprehensive Observation Network for TRace gases by AIrLiner)

日航財団、国立環境研究所などが2006年から実施している定期旅客便による観測計画。

CPU (Central Processing Unit)

中央処理装置。プログラムによって様々な数値計算や情報処理、機器制御などを行うコンピュータにおける中心的な回路。

CSIRO (Commonwealth Scientific and Industrial Research Organization)

豪州連邦科学産業研究機構

CTM (Chemistry Transport Model)

化学輸送モデル

CUL (CUbic Lagrangean method)

キュービック・ラグランジュ法。移流計算方法のセミラグランジュ法の一つで、補間の際に、4つの格子点を通る3次関数を当てはめる点の特徴。

DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt)

ドイツ航空宇宙センター (ドイツ)

ECHAM3/CHEM (GCM developed at MPI-Met in HAMburg based on ECmwf model with CHEMistry module)

ドイツ航空宇宙センター、マックスプランク気象研究所などが開発している3次元大気大循環-化学結合モデル。

ECMWF (European Center for Medium-range Weather Forecast)

欧州中期気象予報センター

GRIB (GRIdded Binary)

WMO が 1995 年に提唱した大量の格子点データの高圧縮パッケージ法、あるいはその方式によって圧縮されたデータの書式。

GRIBEX (GRIdded Binary)

ECMWF が作成した、GRIB データの読み出し・書き込みを行うためのサブルーチン・ライブラリ。

GSFC (Goddard Space Flight Center)

NASA ゴダード宇宙飛行センター (米国)

HARVARD

ハーバード大学 (米国)

HALOE (Halogen Occultation Experiment)

米国の人工衛星 UARS に搭載のセンサー。ClO_y、NO_y、HO_y、O₃、HCl、CH₄、H₂O、

NO、NO₂、CO₂、CFC、HF、エアロゾルを全球規模で計測する。

ICAO (International Civil Aviation Organization)

国際民間航空機構

IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change)

気候変動に関する政府間パネル

JMA (Japan Meteorological Agency)

気象庁 (日本)

JPL (Jet Propulsion Laboratory)

NASA ジェット推進研究所 (米国)

LaRC (Langley Research Center)

NASA ラングレー研究センター (米国)

LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory)

ローレンス・リバモア国立研究所 (米国)

MOZART (Model of Ozone and Related Chemical Tracers)

米国大気研究センター・米国気象海洋庁 地球流体研究所・マックスプランク気象研究所が共同開発した化学輸送モデル。コミュニティー・モデルとしてソースコードが公開されている。

MPI (Max-Planck Institut)

マックスプランク研究所 (ドイツ)

MPI-Met (Max-Planck Institut für Meteorologie)

マックスプランク気象研究所 (ドイツ)

NASA (National Aeronautics and Space Administration)

米国航空宇宙局 (米国)

NCAR (National Center for Atmospheric Research)

国立大気研究センター (米国)

NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration)

国立気象海洋庁 (米国)

NOCAR

NCAR の R. Garcia 博士と NOAA の S. Solomon 博士の共同研究グループ（一般的な名称ではない）

OpenMP

並列コンピューティング環境を利用するために用いられる標準化された基盤。主に共有メモリ型並列計算機で用いられる。

PSC (Polar Stratospheric Cloud)

極域成層圏雲。冬季の極域成層圏で発生する雲。硝酸と水を主成分とするタイプ I と、氷の粒子であるタイプ II がある。その表面で起きる異相反応によって極域春季オゾン減少が起きると考えられている。

SLIMCAT

英国ケンブリッジ大学が開発した 3 次元化学輸送モデル。

SUNY-SPB

SUNY (State University of New York ニューヨーク州立大学) とロシア国立水文気象学研究所 (Russia State Hydrometeorological Institute) の S. P. Smyshlyaev 博士の共同研究グループ（一般的な名称ではない）

UARS (Upper Atmosphere Research Satellite)

1991 年にシャトルから軌道投入された米国の地球観測衛星。ACRIM、CLAES、HALOE、HRDI、ISAMS、MLS、PEM、SOLSTICE、SUSIM、WINDI の 10 センサを搭載している。

UNIVAQ (UNIVersità degli studi l'Aquila)

ラクィラ研究大学（イタリア）

UTC (Coordinated Universal Time)

協定世界時。国際協定により人工的に維持されている世界共通の標準時。

WMO (World Meteorological Organization)

世界気象機関（国連）

参考資料 3 利用マニュアル

1 前提とするシステム

3次元化学輸送モデルはUNIX/Linuxマシンで動作させることを前提として作られている。必要なスペックは以下のとおり。

(1) ハードディスク

CTM 自体 約 2MB

入力データ(主に初期値) 約 100MB

ECMWF 気象データ(1 時刻あたり) 約 2MB

出力データ(1 化学種 1 時刻あたり) 約 2MB

(出力する化学種及び間隔が指定できる。)

(2) 必要メモリ

スワップ領域を含め約 700MB

(3) 補助記憶装置(テープ装置など)

DAT(インストール用)

(4) 必要なソフトウェア

FORTRAN コンパイラ

C コンパイラ(ECMWF 気象データ読み込みルーチンのために必要。)

2 GRIBEX ライブラリインストール手順

3次元化学輸送モデルをインストールするためには GRIBEX サブルーチンのライブラリが必要である。GRIBEX サブルーチンは、ECMWF が開発した GRIB データの圧縮・展開を行うサブルーチンであり、ECMWF の全球客観解析データとともに入手することができる。

以下の説明では、1995 年版の GRIBEX サブルーチンを使用している。動作確認も同版によって行った。

GRIBEX サブルーチンをライブラリ化するには、次の手順に従う。

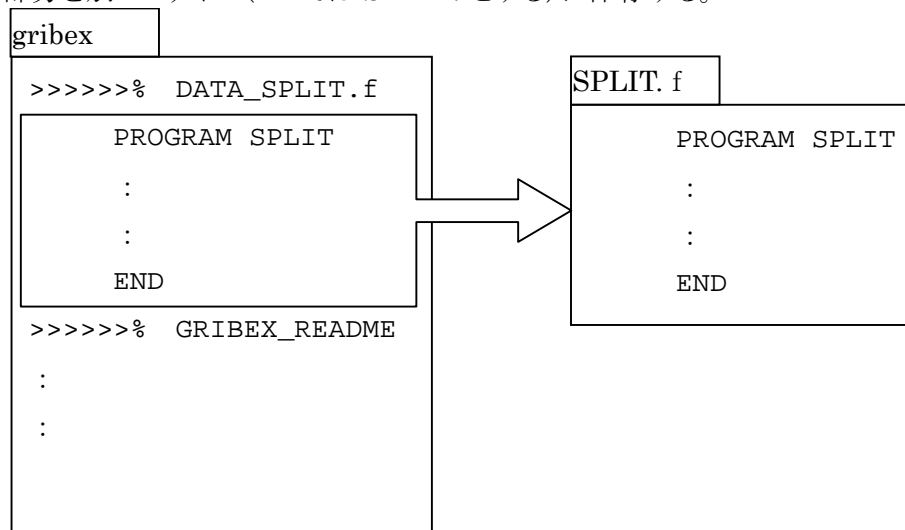
(1) ソースファイルの分割

GRIBEX サブルーチンは 1 つのファイル `gribex` にまとめているので分割する必要がある。そのためには、まず `gribex` を作業用ディレクトリ(ここでは `$HOME/gribex` とする)にコピーする(下線部は入力すべき部分を表わす)。

```
% mkdir $HOME/gribex
% cd $HOME/gribex
% cp ../gribex .
```

`gribex` ファイルをエディタで開き、ファイルの先頭にある FORTRAN ソースコ

ード部分を別のファイル(ここでは SPLIT.fとする)に保存する。



この SPLIT.f をコンパイル・リンクして SPLIT プログラムを作成する。

```
% f77 SPLIT.f -o SPLIT
```

作成した SPLIT プログラムを用いて gribex ファイルを分割する。

```
% SPLIT < gribex
```

すると gribex ファイルが分割され、ドキュメント及び多数の FORTRAN 及び C のソースファイルが生成される。

(2) GRIBEX ライブラリの作成

生成されたドキュメントや Makefile を参考にして、GRIBEX サブルーチンのソースファイルをコンパイルし、オブジェクトファイルを作成する。ここで `-c` オプションをつけ、リンクは行わないことに注意する。

```
% f77 -c calcop.f ...
```

```
% cc -c extras.c ...
```

続いて `ar` コマンドでオブジェクトファイルを結合し、GRIBEX ライブラリファイル `libgribex.a` を作成する。システムによってはさらに `ranlib` コマンドで内容の再構成を行う必要があるかもしれない。

```
% ar rv libgribex.a *.o
```

```
% ranlib libgribex.a
```

3 3次元化学輸送モデルのインストール手順

(1) ソースファイルの展開

3次元化学輸送モデルのアーカイブは以下の2つである。

- `ctm3d-2.1.tar.gz`
- `indata.tar.gz`

これらアーカイブを以下に示す手順で展開する。この説明では、ユーザーのホームディレクトリの下に `ctm3d` という作業ディレクトリを作成し、ソースファイル等はその下に展開することを想定している。

```
% mkdir $HOME/ctm3d
% cd $HOME/ctm3d
% gzip -cd ctm3d-2.1.tar.gz | tar xvf -
% gzip -cd indata.tar.gz | tar xvf -
```

展開が終わると以下のディレクトリが生成される。

```
$HOME/ctm3d
├── indata      入力データファイル
├── src        3次元化学輸送モデルのソース
├── util
│   └── ecmwf
│       └── src  ECMWF気象データ分割ユーティリティ
```

(2) 環境設定

化学輸送モデルのソースのディレクトリ `src` に移動する。

```
% cd src
```

展開されたソースファイルのうち、`filename.incl` をエディタで開き、次の各行の...部を気象データや放射データ等のファイルのパス名に書き換える。但し、パス名のうち、ECMWF 気象データの日付・時刻の部分については表 1 に掲げたマクロを使って書いておく。

```
parameter(fnecm='...')    ECMWF 気象データファイル
parameter(fnsol='...')    太陽放射強度スペクトルデータファイル
parameter(fnabs='...')    吸収断面積データファイル
parameter(fnsr='...')     シューマン・ルング帯吸収データファイル
parameter(fnaero1='...')  エアロソル表面積(1月)データファイル
parameter(fnaero7='...')  エアロソル表面積(7月)データファイル
```

表1 気象データのパス名に用いるマクロ

マクロ	意味
<code>%yyy</code>	西暦年
<code>%m</code>	月

%d	日
%h	時

例えば、ECMWF 気象データの置き場所が /usr/ecmwf の下で、ファイル名が「ecmwf1995010312.data」(1995 年 1 月 3 日 12 時のデータの場合)のようになっている場合は以下のようなようになる。

```
parameter( fnecm= ' /usr/ecmwf/ecmwf%yyy%m%d%h.data' )
```

filename.incl は FORTRAN77 のソースの一部なので、その文法に従って記述しなければならない。例えば 1 行あたりの文字数は 72 桁以下でなければならず、それを超える場合は次の行の 1~5 桁目は空白、6 桁目は '0' 及び空白以外の文字とし、7 桁目以降に継続行を記述する。

(3) コンパイル

次に Makefile をエディタで開き、次の例のように GRIBEX ライブラリ libgribex.a (1 で作成したもの) のあるディレクトリ名及びファイル名を指定する。

```
LDLIBDIR=-L/usr/gribex
LIBS=/usr/gribex/libgribex.a
```

編集した Makefile を保存した後、make コマンドで 3 次元化学輸送モデルをコンパイルする。完成したロードモジュール ctm3d はパスの登録されているディレクトリにコピーしておく。

4 気象データの準備

3 次元化学輸送モデルを実行するには、ECMWF 全球気象解析データ Basic Level III-A Global Atmospheric Data Archive を入手し、準備しなければならない。その手順を説明する。

(1) ECMWF 全球気象解析データ

ECMWF の全球気象解析データは ECMWF を通じて購入することができる。データは IBM3480 互換カートリッジテープ (CMT) に収録されているので、テープドライブから読み出し、ハードディスクに転送する。

データは 1 ヶ月分のデータが 1 つのデータセットに収められているが、3 次元化学輸送モデルでは気象データを時刻ごとに分割しておいた方が効率的である。ファイルの分割には添付のユーティリティソフト split_ecmwf を用いる。そのためにはまずソースファイルのあるディレクトリ \$HOME/ctm3d/util/ecmwf/src に移動する。

```
% cd $HOME/ctm3d/util/ecmwf/src
```

次に `Makefile.split` をエディタで開き、次の例のように `GRIBEX` ライブラリ `libgribex.a` (1で作成したもの) のあるディレクトリ名を指定する。

```
LDLIBDIR=-L/usr/gribex
```

編集した `Makefile.split` を保存した後、ソースファイル `split_ecmwf.f` をコンパイルする。

```
% make -f Makefile.split
```

次に `ECMWF` 全球気象解析データのあるディレクトリ(ここでは例えば `/usr/met/ecmwf` とする)に移動し、コンパイル済みのユーティリティを起動する。ファイル名を聞かれるので、1ヶ月分まとめられた気象データファイル名(例えば `ecmwf9901.data`)を入力する。

```
% cd /usr/met/ecmwf  
% $HOME/ctm3d/util/ecmwf/src/split_ecmwf  
Enter file name.  
ecmwf9901.data
```

分割した気象データは例えば `ecmwf19990101.z00` のような名前のファイルに収められる。これらは1つのディレクトリ下にまとめておかなければならない。このディレクトリ名が例えば `/usr/met/ecmwf` であれば、トラジェクトリー解析システムのソースファイル `const.incl` の設定は以下のようになる。

```
parameter( fnecm= ' /usr/met/ecmwf/ecmwf%yyy%m%d.z%h' )
```

5 利用方法

(1) 3次元化学輸送モデルの起動

3次元化学輸送モデルは対話的な実行には向いていない。次節に述べるパラメータファイルを作成し、以下の例のようにファイルリダイレクションによって入力することを勧める(下線部はユーザーの入力を表わす)。

```
% ctm3d < parameters
```


6 入出力ファイルについて

(1) パラメータファイル

- ファイル名: 任意
- 形式: 書式付き、順アクセス
- レコード形式: 可変長(100 バイト以内)

パラメータファイルはいずれも最初の 15 バイトが項目欄、その後の 85 バイトが
入力欄となっている。

最初の項目欄の部分は、1 文字でも違うとコメントとみなされ無効となるので、サ
ンプルのまま編集しない方がよい。

(a) 開始時刻

シミュレーションの開始時刻を指定する。

	項目欄		入力欄				
内容	START TIME		年	月	日	時	分
単位			(西暦)				
変数名			iyr0	imo0	idy0	ihr0	imi0
書式	A14	1X	I5	I5	I5	I5	I5

(b) 終了時刻

シミュレーションの終了時刻を指定する。

	項目欄		入力欄				
内容	END TIME		年	月	日	時	分
単位			(西暦)				
変数名			iyr1	imo1	idy1	ihr1	imi1
書式	A14	1X	I5	I5	I5	I5	I5

(c) 時間増分

時間刻み(増分)を指定する。

	項目欄		入力欄				
内容	DEL MINUTE		時間刻み				
単位			(分)				
変数名			idt				
書式	A14	1X	I 10				

(d) 不均一反応スイッチ

不均一反応を計算するかどうかを指定する。

	項目欄		入力欄	
内容	SW HET		不均一反応スイッチ	
単位				
変数名			ihet	
書式	A14	1X	I10	

ihet 不均一反応スイッチ (1:計算する。0:計算しない。)

(e) 初期値ファイル格納ディレクトリ

各化学種の初期値ファイルを格納するディレクトリを指定する。

	項目欄		入力欄	
内容	INIT DIR		初期値ファイル格納ディレクトリ	
単位				
変数名			initdir	
書式	A14	1X	A85	

(f) 各化学種の初期値ファイル名

各化学種の初期値ファイル名を指定する。

	項目欄		入力欄	
内容	INIT 化学種名		各化学種の計算方法	初期値ファイル名
単位				
変数名			icntl(js)	fninit(js)
書式	A14	1X	I5	A80

icntl(js) 計算方法 (1:計算しない, 2:光化学平衡,
3:局所的時間積分, 4:輸送方程式)

fninit(js) 各化学種の初期値ファイル名

(g) 地上境界条件ファイル格納ディレクトリ

各化学種の地上境界条件ファイルを格納するディレクトリを指定する。

	項目欄		入力欄	
内容	SURF DIR		地上境界条件ファイル格納ディレクトリ	
単位				
変数名			surfdir	
書式	A14	1X	A85	

(h) 各化学種の地上境界条件ファイル名

各化学種の地上境界条件ファイル名を指定する。

	項目欄		入力欄	
内容	SURF 化学種名		地上境界条件	地上境界条件ファイル名
単位				
変数名			ibcbtm(js)	fnsurf(js)
書式	A14	1X	I5	A80

ibcbtm(js) 地上境界条件 (0: 体積混合比, 1: 分子数のフラックス, 2: 沈着速度)

fnsurf(js) 各化学種の地上境界条件ファイル名

(i) 上端境界条件ファイル格納ディレクトリ

各化学種の上端境界条件ファイルを格納するディレクトリを指定する。

	項目欄		入力欄	
内容	TOP DIR		上端境界条件ファイル格納ディレクトリ	
単位				
変数名			topdir	
書式	A14	1X	A85	

(j) 各化学種の上端境界条件ファイル名

各化学種の上端境界条件ファイル名を指定する。

	項目欄		入力欄	
内容	TOP 化学種名		上端境界条件	上端境界条件ファイル名
単位				
変数名			ibctop(js)	fntop(js)
書式	A14	1X	I5	A80

ibctop(js) 上端境界条件 (0: 体積混合比, 1: 分子数のフラックス)

fntop(js) 各化学種の上端境界条件ファイル名

(k) 出力間隔

各化学種の出力ファイルの出力間隔を指定する。

	項目欄		入力欄	
内容	OUT INTVL		出力間隔	
単位				

変数名			intval
書式	A14	1X	I10

(l) 出力ファイル格納ディレクトリ

出力ファイルを格納するディレクトリを指定する。

	項目欄	入力欄	
内容	OUT DIR	出力ファイル格納ディレクトリ	
単位			
変数名		outdir	
書式	A14	1X	A85

(m) 各化学種の出力ファイル名

各化学種の出力ファイル名を指定する。

	項目欄	入力欄	
内容	OUT XXX	出力スイッチ	ファイル名
単位			
変数名		iout	fnout
書式	A14	1X	L5 A80

iout 出力スイッチ (Tのとき出力する。Fのとき出力しない。)

fnout 出力ファイル名

(2) 初期値ファイル

- ファイル名: パラメータファイル内で指定したもの
- 形式: 書式なし、順アクセス

初期値ファイルは次の FORTRAN 入力文で読めるようになっていなければならない。

```
REAL*8 EF(144,72,15)
READ(1) ((EF(IX,IY,IZ),IX=1,144),IY=1,72),IZ=1,15)
```

(3) 地表境界値ファイル

- ファイル名: パラメータファイル内で指定したもの
- 形式: 書式なし、順アクセス

地表境界値ファイルは次の FORTRAN 入力文で読めるようになっていなければならない。

```
REAL*8 SURF(144,72)
READ(1) ((SURF(IX,IY),IX=1,144),IY=1,72)
```

(4) 上端境界値ファイル

- ファイル名: パラメータファイル内で指定したもの
- 形式: 書式なし、順アクセス

上端境界値ファイルは次の FORTRAN 入力文で読めるようになっていなければならない。

```
REAL*8 TOP(144,72)
READ(1) ((TOP(IX,IY),IX=1,144),IY=1,72)
```

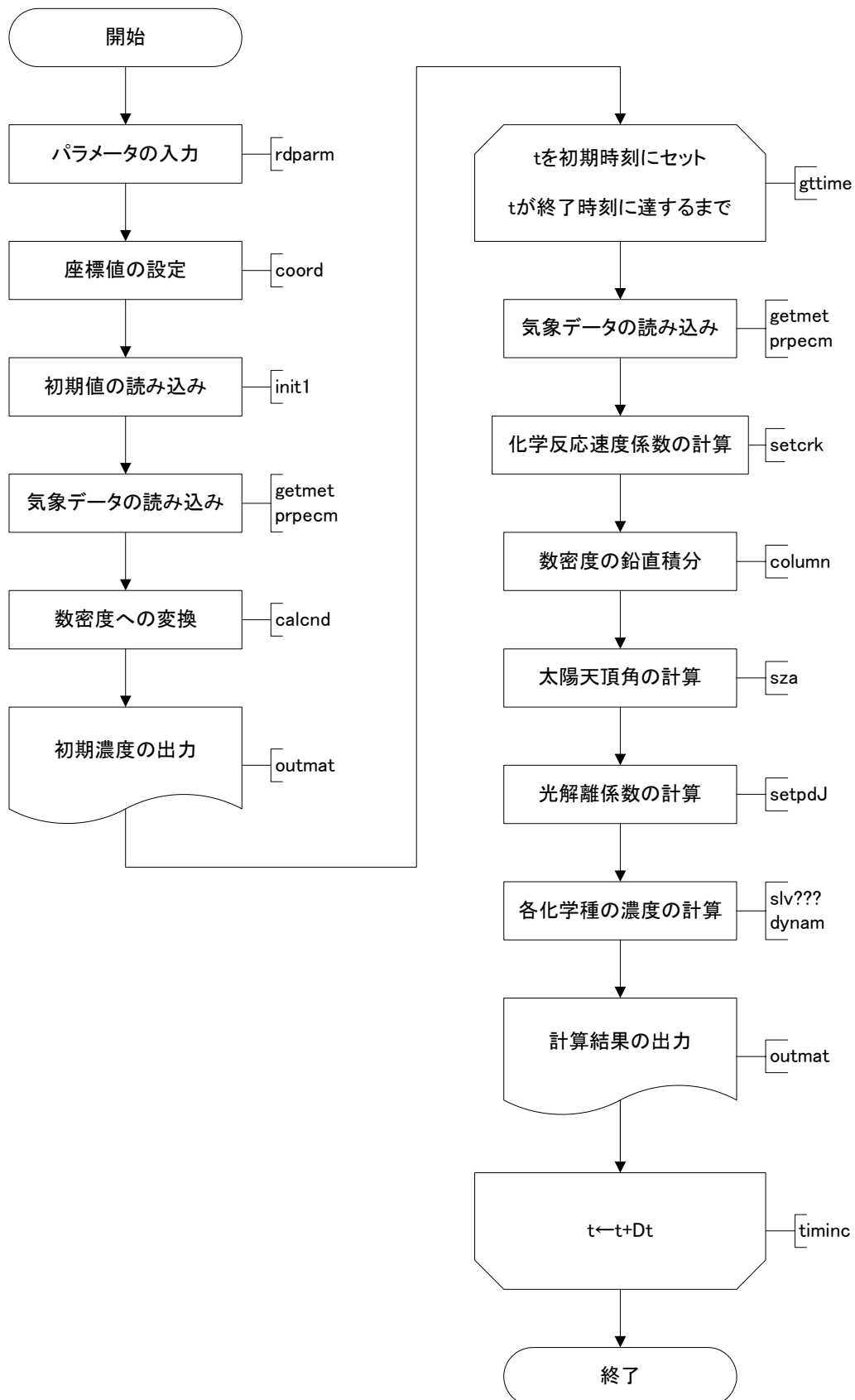
(5) 出力ファイル

- パラメータファイル内で指定したもの
- 形式: 書式なし、順アクセス

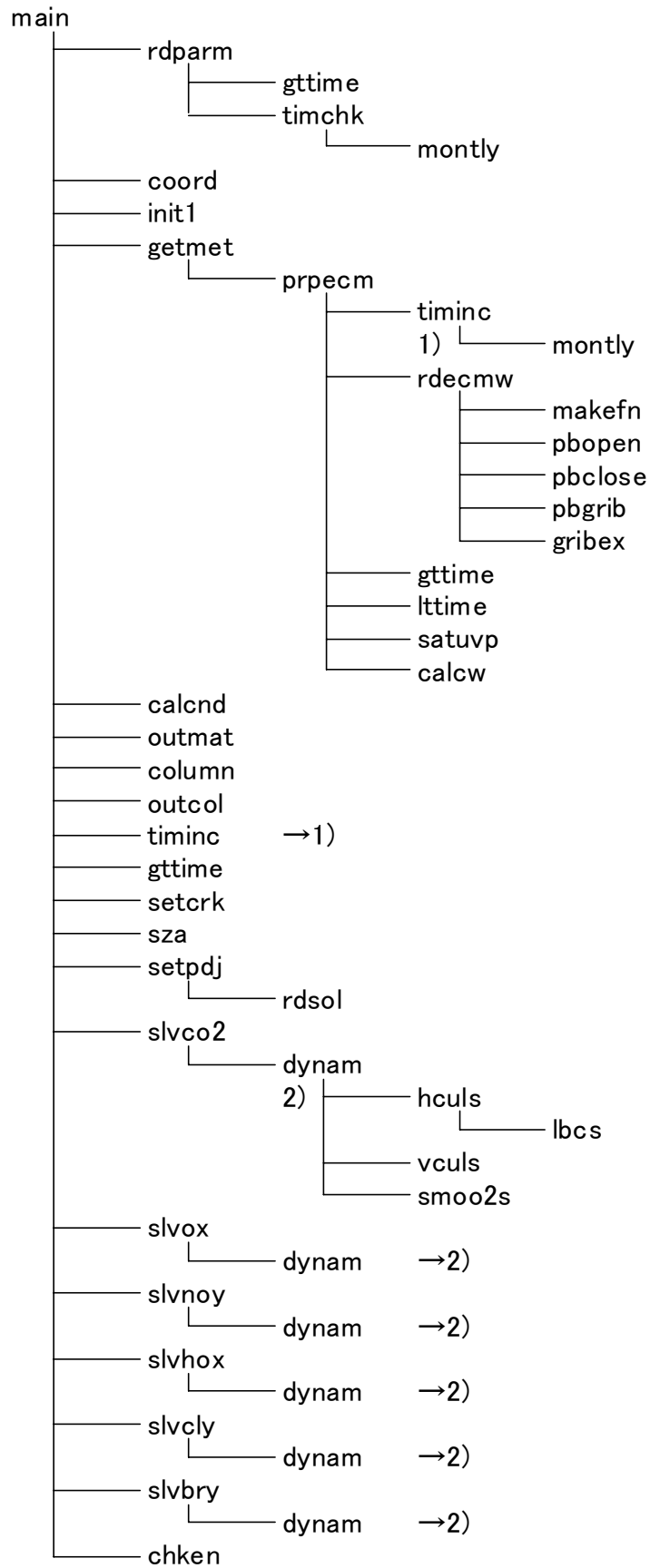
出力ファイルは、パラメータファイルで出力スイッチを ON にした場合のみ作成される。いずれも同じ形式で、次の FORTRAN 出力文で書き出される。

```
REAL*8 EF(144,72,15)
WRITE(1) ((EF(IX,IY,IZ),IX=1,144),IY=1,72),IZ=1,15)
```

フローチャート



関数・サブルーチン ツリー図



関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：calcnd

ファイル名：calcnd.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
p	R*8	nlev	I	気圧
T	R*8	nlon, nlat, nlev	I	気温
ef	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	体積混合比
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	数密度

戻り値：

なし

機能：

体積混合比を数密度に変換する。

呼び出しルーチン：

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : calcw

ファイル名 : calcw.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
lmd	R*8	nlon	I	セル中心の経度
lmdu	R*8	nlon	I	セル境界の経度
dlmd	R*8	-	I	経度の間隔
phi	R*8	nlat	I	セル中心の緯度
phiv	R*8	nlat+1	I	セル境界の緯度
dphi	R*8	-	I	緯度の間隔
zet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度
zetw	R*8	nlev+1	I	セル境界の対数気圧高度
dzet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度の間隔
dzetw	R*8	nlev	I	セル境界の対数気圧高度の間隔
u	R*8	nlon, nlat, nlev	I	東西風速
v	R*8	nlon, nlat+1, nlev	I	南北風速
w	R*8	nlon, nlat, nlev+1	O	鉛直風速

戻り値 :

なし

機能 :

東西風速及び南北風速を元に、連続の式を満たす鉛直風速を求める。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：chken

ファイル名：chken.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	数密度

戻り値：

なし

機能：

数密度が負になっていないか確認する。負の数密度を検出したら実行を中止する。

呼び出しルーチン：

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : column

ファイル名 : column.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
z	R*8	nlon, nlat, nlev	I	高度
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	数密度
T	R*8	nlon, nlat, nlev	I	気温
vsum	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	各高度から大気上端までの積算数密度
col	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	O	コラム数密度 (地表から大気上端までの積算数密度)

戻り値 :

なし

機能 :

数密度から、各高度から大気上端までの積算数密度及びコラム数密度 (地表から大気上端までの積算数密度) を求める。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : coord

ファイル名 : coord.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
lmd	R*8	nlon	O	セル中心の経度
lmdu	R*8	nlon	O	セル境界の経度
dlmd	R*8	-	O	経度の間隔
phi	R*8	nlat	O	セル中心の緯度
phiv	R*8	nlat+1	O	セル境界の緯度
dphi	R*8	-	O	緯度の間隔
p	R*8	nlev	O	セル中心の気圧
zet	R*8	nlev	O	セル中心の対数気圧高度
zetw	R*8	nlev+1	O	セル境界の対数気圧高度
dzet	R*8	nlev	O	セル中心の対数気圧高度の間隔
dzetw	R*8	nlev	O	セル境界の対数気圧高度の間隔

戻り値 :

なし

機能 :

経度、緯度、対数気圧の各座標値を設定する。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : dynam

ファイル名 : dynam.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
js	I	-	I	化学種の番号
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
lmd	R*8	nlon	I	セル中心の経度
lmdu	R*8	nlon	I	セル境界の経度
dlmd	R*8	-	I	経度の間隔
phi	R*8	nlat	I	セル中心の緯度
phiv	R*8	nlat+1	I	セル境界の緯度
dphi	R*8	-	I	緯度の間隔
zet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度
zetw	R*8	nlev+1	I	セル境界の対数気圧高度
dzet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度の間隔
dzetw	R*8	nlev	I	セル境界の対数気圧高度の間隔
dt	R*8	-	I	時間増分
u	R*8	nlon, nlat, nlev	I	東西風速
v	R*8	nlon, nlat+1, nlev	I	南北風速
w	R*8	nlon, nlat, nlev+1	I	鉛直風速
prod	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	(化学反応による) 生成率 (=0)
loss	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	(化学反応による) 消滅係数 (=0)
list	I	*	W	計算領域
ln	I	*	W	計算領域
trop	I	nlon, nlat, nlev	I	対流圏フラグ
ibcbtm	I	-	I	地表境界条件
ibctop	I	-	I	大気上端境界条件
surf	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での体積混合比
flxbtm	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表でのフラックス
drydep	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での沈着速度
top	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端での体積混合比
flxtop	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端でのフラックス

en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	数密度
ef	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	体積混合比
A000	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
Ap00	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
Am00	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
A0p0	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
A0m0	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
A00p	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
A00m	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
bb	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
sol	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
fp	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域
fm	R*8	nlon, nlat, nlev	W	計算領域

戻り値 :

なし

機能 :

連続の式を解き、化学種の数密度及び体積混合比を求める。

呼び出しルーチン :

hculs

vculs

smoo2s

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : getmet

ファイル名 : getmet.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
iyр	I	-	I	年
imo	I	-	I	月
idy	I	-	I	日
ihr	I	-	I	時
imi	I	-	I	分
nlon	I	-	I	経度分割数
nlat	I	-	I	緯度分割数
nlev	I	-	I	高度分割数
lat0	R*8	nlat	I	緯度
lev0	R*8	nlev	I	気圧
ulon	R*8	nlon,nlat,nlev	O	東西風
vlat	R*8	nlon,nlat,nlev	O	南北風
wvrt	R*8	nlon,nlat,nlev	O	鉛直風
T	R*8	nlon,nlat,nlev	O	気温
z	R*8	nlon,nlat,nlev	O	等圧面高度
vapr	R*8	nlon,nlat,nlev	O	水蒸気量
pssl	R*8	nlon,nlat	O	地上気圧
hsrfl	R*8	nlon,nlat	O	地表気圧
clcd	L	nlon,nlat	O	気象パラメータ計算完了フラグ
ierr	I	-	O	エラーコード

戻り値 :

なし

機能 :

指定時刻の気象データを取得する。

呼び出しルーチン :

prpecm

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : gribex

ファイル名 : gribex.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
ksec0	I	2	O	デコードされたデータ (セクション 0)
ksec1	I	60	O	デコードされたデータ (セクション 1)
ksec2	I	384	O	デコードされたデータ (セクション 2 整数部)
psec2	R	96	O	デコードされたデータ (セクション 2 実数部)
ksec3	I	2	O	デコードされたデータ (セクション 3 整数部)
psec3	R	2	O	デコードされたデータ (セクション 3 実数部)
ksec4	I	42	O	デコードされたデータ (セクション 4 整数部)
psec4	R	klenp	O	デコードされたデータ (セクション 4 実数部)
klenp	I	-	I	psec4 の大きさ
kgrib	I	kleng	I	データバッファ
kleng	I	-	I	kgrib の大きさ
keyword	I	-	I	GRIB 形式に変換されたデータ数 (未使用)
hoper	C*1	-	I	GRIBEX の動作スイッチ
kret	I	-	O	エラーコード

戻り値 :

なし

機能 :

ECMWF 気象データの 1 レコードをデコードし、セクション 0 からセクション 4 までの情報を取り出す。

(元々は GRIB 形式のデータのエンコード・デコードその他さまざまな操作を行う大きなルーチン。ECMWF の気象解析データに付属していたもの。)

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : LOGICAL 名称 : gtime

ファイル名 : gtime.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
iy0	I	-	I	時刻 1 の年
im0	I	-	I	時刻 1 の月
id0	I	-	I	時刻 1 の日にち
ih0	I	-	I	時刻 1 の時間
im0	I	-	I	時刻 1 の分
iy1	I	-	I	時刻 2 の年
im1	I	-	I	時刻 2 の月
id1	I	-	I	時刻 2 の日にち
ih1	I	-	I	時刻 2 の時間
im1	I	-	I	時刻 2 の分

戻り値 :

時刻 1 が時刻 2 より未来であれば真、そうでなければ偽。

機能 :

2 つの時刻を入力し、比較を行う。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : hculs

ファイル名 : hculs.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
dx	R*8	-	I	経度格子幅
dy	R*8	-	I	緯度格子幅
dtb	R*8	-	I	CUL 法のタイムステップ
ni	I	-	I	緯度格子点数+3
nj	I	-	I	経度格子点数+3
nk	I	-	I	高度格子点数
lat	R*8	2:nj-2	I	各格子点の緯度
up	R*8	2:ni-2, 2:nj-2, nk	I	経度方向の風速
vp	R*8	2:ni-2, 2:nj-2, nk	I	緯度方向の風速
sp	R*8	0:ni, 0:nj, nk	I	水平移流前の任意のスカラー量
sf	R*8	2:ni-2, 2:nj-2, nk	O	水平移流後の任意のスカラー量
dxt22	R*8	0:ni	W	CUL 法の計算時に係数になる配列
dxt16	R*8	0:ni	W	CUL 法の計算時に係数になる配列
dxt36w	R*8	0:ni	W	CUL 法の計算時に係数になる配列
dxt36e	R*8	0:ni	W	CUL 法の計算時に係数になる配列
dxt22	R*8	0:nj	W	CUL 法の計算時に係数になる配列
dxt16	R*8	0:nj	W	CUL 法の計算時に係数になる配列
dxt36s	R*8	0:nj	W	CUL 法の計算時に係数になる配列
dxt36n	R*8	0:nj	W	CUL 法の計算時に係数になる配列

戻り値 :

なし

機能 :

緯度・経度方向に、任意のスカラー量に対して、CUL 法による移流の計算をする。

呼び出しルーチン :

lbc

関数・サブルーチン リスト

型 : BLOCKDATA 名称 : init0

ファイル名 : init0.f

引数 :

なし

戻り値 :

なし

機能 : プログラムの実行前に化学種名を設定する。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : init1

ファイル名 : init1.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
fninit	C*255	0:nspc	I	初期値ファイル名
ibcbtm	I	-	I	地表境界条件
fnsurf	C*255	0:nspc	I	地表境界値ファイル名
ibctop	I	-	I	大気上端境界条件
fntop	C*255	0:nspc	I	大気上端境界値ファイル名
fneNOy	C*255	-	I	NOy 排出量ファイル名
ef	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	体積混合比
surf	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	O	地表での体積混合比
flxbtm	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	O	地表でのフラックス
drydep	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	O	地表での沈着速度
top	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	O	大気上端での体積混合比
flxtop	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	O	大気上端でのフラックス
eNOy	R*8	nlon, nlat, nlev	O	数密度

戻り値 :

なし

機能 : 指定されたファイルから、初期値及び境界値を読み込む。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : lbcS

ファイル名 : lbcS.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
ni	I	-	I	経度格子点数+3
nj	I	-	I	緯度格子点数+3
nk	I	-	I	高度格子点数
s	R*8	0:ni, 0:nj, nk	I/O	任意のスカラー量
dvt36s	R*8	0:nj	W	CUL 法の計算時に係数になる配列
dvt36n	R*8	0:nj	W	CUL 法の計算時に係数になる配列

戻り値 :

なし

機能 :

CUL 法の適用時に、任意のスカラー量に対して、緯度・経度方向の境界条件を設定する。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : LOGICAL 名称 : ltime

ファイル名 : ltime.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
iy0	I	-	I	時刻 1 の年
im0	I	-	I	時刻 1 の月
idy0	I	-	I	時刻 1 の日にち
ihr0	I	-	I	時刻 1 の時間
imi0	I	-	I	時刻 1 の分
iy1	I	-	I	時刻 2 の年
im1	I	-	I	時刻 2 の月
idy1	I	-	I	時刻 2 の日にち
ihr1	I	-	I	時刻 2 の時間
imi1	I	-	I	時刻 2 の分

戻り値 :

時刻 1 が時刻 2 より過去であれば真、そうでなければ偽。

機能 :

2 つの時刻を入力し、比較を行う。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : PROGRAM 名称 : main

ファイル名 : ctm3d.f

引数 :

なし

戻り値 :

なし

機能 : 3次元物質輸送モデルのメイン・ルーチン。

呼び出しルーチン :

rdparm

coord

init1

getmet

calcnd

outmat

column

outcol

timinc

gttime

setcrk

sza

setpdj

slvco2

slvox

slvnoy

slvhox

slvcly

slvbry

chken

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：makefn

ファイル名：makefn.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
metfn	R*256	-	I	気象データファイル名のテンプレート
iyр	I	-	I	年
imo	I	-	I	月
idy	I	-	I	日
ihr	I	-	I	時
imi	I	-	I	分
fname	R*256	-	O	気象データファイル名

戻り値：

なし

機能：

気象データファイル名のテンプレートから、指定された時刻の気象データファイル名を作る。
まず metfn を fname にコピーし、その中から次の文字列の置換を行う。

検索文字列	置換文字列
%yyy	指定された年(西暦)
%n	指定された年(西暦の下 2 桁)
%m	指定された月(1 桁の場合 0 を補う)
%d	指定された日(1 桁の場合 0 を補う)
%h	指定された時(1 桁の場合 0 を補う)

分の検索は行わない。

呼び出しルーチン：

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : montly

ファイル名 : timinc.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
iyр	I	-	I	現在の年
imo	I	-	I	現在の月
ndy	I	-	O	その月の日数

戻り値 :

なし

機能 :

指定された年・月の日数を求める。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : outmat

ファイル名 : output.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
ounit	I	-	I	出力装置番号
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
N4min	I	-	I	配列寸法下限値
N4max	I	-	I	配列寸法上限値
mat	R*8	nlon, nlat, nlev, N4min:N4max	I	出力すべき配列
N4s	I	-	I	出力すべき配列添字下限値
N4e	I	-	I	出力すべき配列添字上限値

戻り値 :

なし

機能 : 体積混合比などの 3 次元データをファイルに出力する。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : outcol

ファイル名 : output.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
ounit	I	-	I	出力装置番号
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
col	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	コラム数密度

戻り値 :

なし

機能 : コラム数密度をファイルに出力する。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：pbclose

ファイル名：newpbio.c

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
unit	I	-	I	装置番号
iret	I	-	O	エラーコード

戻り値：

なし

機能：

ECMWF 気象データファイルを閉じる。

呼び出しルーチン：

なし

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：pbgrib

ファイル名：pbio.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
kunit	I	-	I	装置番号
karray	I	*	O	データバッファ
kinlen	I	-	I	データバッファの大きさ
koutlen	I	-	O	読み込まれたデータの大きさ
kret	I	-	O	エラーコード

戻り値：

なし

機能：

ECMWF 気象データバッファを読み込む。

(ECMWF の気象データに付属していたもの。)

呼び出しルーチン：

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : pbopen

ファイル名 : newpbio.c

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
unit	I	-	I	装置番号
name	C*256	-	I	ファイル名
mode	C*(*)	-	I	ファイルのオープンモード
iret	I	-	O	エラーコード

戻り値 :

なし

機能 :

ECMWF 気象データファイルを開く。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：prpecm

ファイル名：prpecm.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
iyр	I	-	I	年
imo	I	-	I	月
idy	I	-	I	日
ihr	I	-	I	時
imi	I	-	I	分
nlon	I	-	I	経度分割数
nlat	I	-	I	緯度分割数
nlev	I	-	I	気圧分割数
lat0	R*8	nlat	I	緯度
lev0	R*8	nlev	I	気圧
ulon	R*8	nlon,nlat,nlev	O	東西風
vlat	R*8	nlon,nlat,nlev	O	南北風
wvrt	R*8	nlon,nlat,nlev	O	鉛直風
T	R*8	nlon,nlat,nlev	O	気温
z	R*8	nlon,nlat,nlev	O	等圧面高度
vapr	R*8	nlon,nlat,nlev	O	相対湿度
pssl	R*8	nlon,nlat	O	地上気圧
hsrf	R*8	nlon,nlat	O	地形 (標高)
clcd	L	nlon,nlat	O	気象パラメータ計算完了フラグ
ierr	I	-	O	エラーコード

戻り値：

なし

機能：

必要であれば rdecmw をコールして、指定時刻の ECMWF データを時間方向に補間して取り出す。また気象データ配列の並べ替えを行う。

呼び出しルーチン：

timinc

rdecmw

gtime

ltime
satvp
calcw

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：rdecmw

ファイル名：rdecmw.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
iyр	I	-	I	年
imo	I	-	I	月
idy	I	-	I	日
ihr	I	-	I	時
imi	I	-	I	分
ecdat	R*8	144,73,15,6	O	ECMWF 気象データ
sufdat	R*8	144,73,2	O	ECMWF 地上データ
ierr	I	-	O	エラーコード

戻り値：

なし

機能：

指定された時刻の ECMWF 気象データを読みだす。

(ECMWF 気象データに付属していた AGRDEMO.F をもとに作成した。)

呼び出しルーチン：

makefn

pbopen

pbclose

pbgrib

gribex

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：rdparm

ファイル名：rdparm.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nspc	I	-	I	化学種数
iy0	I	-	O	計算開始年
imo0	I	-	O	計算開始月
idy0	I	-	O	計算開始日
ihr0	I	-	O	計算開始時
imi0	I	-	O	計算開始分
iy1	I	-	O	計算終了年
imo1	I	-	O	計算終了月
idy1	I	-	O	計算終了日
ihr1	I	-	O	計算終了時
imi1	I	-	O	計算終了分
fninit	C*255	0:nspc	O	初期位置ファイル名
icntl	I	0:nspc	O	計算方法
ibcbtm	I	0:nspc	O	地表境界条件
fnsurf	C*255	0:nspc	O	地表境界条件ファイル名
ibctop	I	0:nspc	O	大気上端境界条件
fntop	C*255	0:nspc	O	大気上端境界条件ファイル名
fneNOy	C*255	-	O	NOy 排出量ファイル名
intval	I	-	O	出力間隔 (時間ステップ)
iout	L	0:nspc	O	出力スイッチ
ounit	I	0:nspc	O	出力装置番号
fnout	C*255	0:nspc	O	出力ファイル名

戻り値：

なし

機能：

パラメータファイルから、計算設定条件を読み込む。

呼び出しルーチン：

gttime

timchk

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：rdsol

ファイル名：rdsol.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nwav	I	-	I	波長分割数
nsr	I	-	I	Schumann-Runge 帯分割数
solar	R*8	nwav	O	太陽放射強度スペクトル
abO3	R*8	nwav	O	オゾンの吸収断面積
abO2	R*8	nwav	O	酸素分子の吸収断面積
abH2O	R*8	nwav	O	H ₂ O の吸収断面積
abN2O	R*8	nwav	O	N ₂ O の吸収断面積
abN2O5	R*8	nwav	O	N ₂ O ₅ の吸収断面積
abHNO3	R*8	nwav	O	HNO ₃ の吸収断面積
abNO2	R*8	nwav	O	NO ₂ の吸収断面積
abHO2	R*8	nwav	O	HO ₂ の吸収断面積
abH2O2	R*8	nwav	O	H ₂ O ₂ の吸収断面積
abCH4	R*8	nwav	O	CH ₄ の吸収断面積
abCHO1	R*8	nwav	O	CH ₂ O の吸収断面積 (CHO+H)
abCHO2	R*8	nwav	O	CH ₂ O の吸収断面積 (H ₂ +CO)
abCO2	R*8	nwav	O	CO ₂ の吸収断面積
abHOCl	R*8	nwav	O	HOCl の吸収断面積
abClON	R*8	nwav	O	ClONO ₂ の吸収断面積
abHNO2	R*8	nwav	O	HNO ₂ の吸収断面積
abCCl4	R*8	nwav	O	CCl ₄ の吸収断面積
abF11	R*8	nwav	O	CFCl ₃ の吸収断面積
abF12	R*8	nwav	O	CF ₂ Cl ₂ の吸収断面積
abHCl	R*8	nwav	O	HCl の吸収断面積
abCH3l	R*8	nwav	O	CH ₃ Cl の吸収断面積
abCH3CCl3	R*8	nwav	O	CH ₃ CCl ₃ の吸収断面積
abCH3Br	R*8	nwav	O	CH ₃ Br の吸収断面積
abClNO2	R*8	nwav	O	ClNO ₂ の吸収断面積
abOCIO	R*8	nwav	O	OCIO の吸収断面積
abCl2O2	R*8	nwav	O	Cl ₂ O ₂ の吸収断面積
abCl2	R*8	nwav	O	Cl ₂ の吸収断面積
abBrONO2	R*8	nwav	O	BrONO ₂ の吸収断面積

abBrCl	R*8	nwav	O	BrCl の吸収断面積
abHOBr	R*8	nwav	O	HOBr の吸収断面積
srsol	R*8	nsr	O	S-R 帯の太陽放射強度スペクトル
srO2a	R*8	nsr	O	S-R 帯における O ₂ の吸収係数 a
srO2b	R*8	nsr	O	S-R 帯における O ₂ の吸収係数 b
srO2c	R*8	nsr	O	S-R 帯における O ₂ の吸収係数 c
srO2d	R*8	nsr	O	S-R 帯における O ₂ の吸収係数 d
srO2r	R*8	nsr	O	S-R 帯における O ₂ の吸収係数 r
srO2m	R*8	nsr	O	S-R 帯における O ₂ の吸収係数 m
srO3	R*8	nsr	O	S-R 帯における O ₃ の吸収係数
srH2O	R*8	nsr	O	S-R 帯における H ₂ O の吸収係数
srN2O	R*8	nsr	O	S-R 帯における N ₂ O の吸収係数
srHNO3	R*8	nsr	O	S-R 帯における HNO ₃ の吸収係数
srNO2	R*8	nsr	O	S-R 帯における NO ₂ の吸収係数
srHO2	R*8	nsr	O	S-R 帯における HO ₂ の吸収係数
srH2O2	R*8	nsr	O	S-R 帯における H ₂ O ₂ の吸収係数
srCO2	R*8	nsr	O	S-R 帯における CO ₂ の吸収係数
srHCl	R*8	nsr	O	S-R 帯における HCl の吸収係数
srClON	R*8	nsr	O	S-R 帯における ClONO ₂ の吸収係数
srCH3l	R*8	nsr	O	S-R 帯における CH ₃ Cl の吸収係数
srCCl4	R*8	nsr	O	S-R 帯における CCl ₄ の吸収係数
srF11	R*8	nsr	O	S-R 帯における CFCl ₃ の吸収係数
srF12	R*8	nsr	O	S-R 帯における CF ₂ Cl ₂ の吸収係数
srHNO2	R*8	nsr	O	S-R 帯における HNO ₂ の吸収係数

戻り値 :

なし

機能 :

太陽放射強度スペクトルおよび吸収断面積のデータ（それぞれ Shumann-Runge 帯の係数を含む）をファイルから読み込む。

呼び出しルーチン :

なし

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：satuvp

ファイル名：satuvp.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
ndata	I	-	I	データ数
temp	R*8	ndata	I	気温[K]
svp	R*8	ndata	O	飽和水蒸気圧

戻り値：

なし

機能：

与えられた気温から飽和水蒸気圧を求める。

呼び出しルーチン：

なし

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：setcrk

ファイル名：setcrk.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
nchm	I	-	I	化学反応種類数
ihet	I	-	I	異相反応のスイッチ
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	数密度
p	R*8	nlev	I	気圧
T	R*8	nlon, nlat, nlev	I	気温
asa	R*8	nlon, nlat, nlev	I	硫酸エアロソルの表面積密度
saPSC	R*8	nlon, nlat, nlev	I	PSC の表面積密度
crk	R*8	nlon, nlat, nlev, nchm	O	化学反応速度係数

戻り値：

なし

機能：

化学反応速度係数を求める。

呼び出しルーチン：

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : setpdJ

ファイル名 : setpdj.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
ndis	I	-	I	光解離種類数
vsum	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	各高度から大気上端までの積算数密度
T	R*8	nlon, nlat, nlev	I	気温
cosx	R*8	nlon, nlat	I	太陽天頂角の余弦
pdJ	R*8	nlon, nlat, nlev, ndis	O	光解離係数
flag	R*8	nlon, nlat	W	昼夜のフラグ

戻り値 :

なし

機能 :

光解離係数を求める。

呼び出しルーチン :

rdsol

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : slvbry

ファイル名 : slvbry.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
nchm	I	-	I	化学反応種類数
ndis	I	-	I	光解離種類数
lmd	R*8	nlon	I	セル中心の経度
lmdu	R*8	nlon	I	セル境界の経度
dlmd	R*8	-	I	経度の間隔
phi	R*8	nlat	I	セル中心の緯度
phiv	R*8	nlat+1	I	セル境界の緯度
dphi	R*8	-	I	緯度の間隔
zet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度
zetw	R*8	nlev+1	I	セル境界の対数気圧高度
dzet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度の間隔
dzetw	R*8	nlev	I	セル境界の対数気圧高度の間隔
dt	R*8	-	I	時間増分
u	R*8	nlon, nlat, nlev	I	東西風速
v	R*8	nlon, nlat+1, nlev	I	南北風速
w	R*8	nlon, nlat, nlev+1	I	鉛直風速
pdJ	R*8	nlon, nlat, nlev, ndis	I	光解離係数
dis	R*8	ndis	W	光解離率
crk	R*8	nlon, nlat, nlev, nchm	I	化学反応速度係数
chem	R*8	nchm	I	化学反応率
prod	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による生成率
loss	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による消滅係数
list	I	*	W	計算領域
ln	I	*	W	計算領域
trop	I	nlon, nlat, nlev	I	対流圏フラグ
ibcbtm	I	-	I	地表境界条件
ibctop	I	-	I	大気上端境界条件

surf	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での体積混合比
flxbtm	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表でのフラックス
drydep	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での沈着速度
top	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端での体積混合比
flxtop	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端でのフラックス
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	数密度
ef	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	体積混合比
tmp	R*8	*	W	計算領域

戻り値 :

なし

機能 :

dynam をコールして連続の式を解き、臭素化合物の数密度及び体積混合比を求める。

呼び出しルーチン :

dynam

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：slvcl

ファイル名：slvcl.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
nchm	I	-	I	化学反応種類数
ndis	I	-	I	光解離種類数
lmd	R*8	nlon	I	セル中心の経度
lmdu	R*8	nlon	I	セル境界の経度
dlmd	R*8	-	I	経度の間隔
phi	R*8	nlat	I	セル中心の緯度
phiv	R*8	nlat+1	I	セル境界の緯度
dphi	R*8	-	I	緯度の間隔
zet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度
zetw	R*8	nlev+1	I	セル境界の対数気圧高度
dzet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度の間隔
dzetw	R*8	nlev	I	セル境界の対数気圧高度の間隔
dt	R*8	-	I	時間増分
u	R*8	nlon, nlat, nlev	I	東西風速
v	R*8	nlon, nlat+1, nlev	I	南北風速
w	R*8	nlon, nlat, nlev+1	I	鉛直風速
pdJ	R*8	nlon, nlat, nlev, ndis	I	光解離係数
dis	R*8	ndis	W	光解離率
crk	R*8	nlon, nlat, nlev, nchm	I	化学反応速度係数
chem	R*8	nchm	I	化学反応率
prod	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による生成率
loss	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による消滅係数
list	I	*	W	計算領域
ln	I	*	W	計算領域
trop	I	nlon, nlat, nlev	I	対流圏フラグ
ibcbtm	I	-	I	地表境界条件
ibctop	I	-	I	大気上端境界条件

surf	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での体積混合比
flxbtm	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表でのフラックス
drydep	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での沈着速度
top	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端での体積混合比
flxtop	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端でのフラックス
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	数密度
ef	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	体積混合比
tmp	R*8	*	W	計算領域

戻り値 :

なし

機能 :

dynam をコールして連続の式を解き、塩素化合物の数密度及び体積混合比を求める。

呼び出しルーチン :

dynam

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : slvco2

ファイル名 : slvco2.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
nchm	I	-	I	化学反応種類数
ndis	I	-	I	光解離種類数
lmd	R*8	nlon	I	セル中心の経度
lmdu	R*8	nlon	I	セル境界の経度
dlmd	R*8	-	I	経度の間隔
phi	R*8	nlat	I	セル中心の緯度
phiv	R*8	nlat+1	I	セル境界の緯度
dphi	R*8	-	I	緯度の間隔
zet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度
zetw	R*8	nlev+1	I	セル境界の対数気圧高度
dzet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度の間隔
dzetw	R*8	nlev	I	セル境界の対数気圧高度の間隔
dt	R*8	-	I	時間増分
u	R*8	nlon, nlat, nlev	I	東西風速
v	R*8	nlon, nlat+1, nlev	I	南北風速
w	R*8	nlon, nlat, nlev+1	I	鉛直風速
pdJ	R*8	nlon, nlat, nlev, ndis	I	光解離係数
dis	R*8	ndis	W	光解離率
crk	R*8	nlon, nlat, nlev, nchm	I	化学反応速度係数
chem	R*8	nchm	I	化学反応率
prod	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による生成率
loss	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による消滅係数
list	I	*	W	計算領域
ln	I	*	W	計算領域
trop	I	nlon, nlat, nlev	I	対流圏フラグ
ibcbtm	I	-	I	地表境界条件
ibctop	I	-	I	大気上端境界条件

surf	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での体積混合比
flxbtm	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表でのフラックス
drydep	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での沈着速度
top	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端での体積混合比
flxtop	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端でのフラックス
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	数密度
ef	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	体積混合比
tmp	R*8	*	W	計算領域

戻り値 :

なし

機能 :

dynam をコールして連続の式を解き、CO₂ の数密度及び体積混合比を求める。

呼び出しルーチン :

dynam

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：slvhox

ファイル名：slvhox.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
nchm	I	-	I	化学反応種類数
ndis	I	-	I	光解離種類数
lmd	R*8	nlon	I	セル中心の経度
lmdu	R*8	nlon	I	セル境界の経度
dlmd	R*8	-	I	経度の間隔
phi	R*8	nlat	I	セル中心の緯度
phiv	R*8	nlat+1	I	セル境界の緯度
dphi	R*8	-	I	緯度の間隔
zet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度
zetw	R*8	nlev+1	I	セル境界の対数気圧高度
dzet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度の間隔
dzetw	R*8	nlev	I	セル境界の対数気圧高度の間隔
dt	R*8	-	I	時間増分
u	R*8	nlon, nlat, nlev	I	東西風速
v	R*8	nlon, nlat+1, nlev	I	南北風速
w	R*8	nlon, nlat, nlev+1	I	鉛直風速
pdJ	R*8	nlon, nlat, nlev, ndis	I	光解離係数
dis	R*8	ndis	W	光解離率
crk	R*8	nlon, nlat, nlev, nchm	I	化学反応速度係数
chem	R*8	nchm	I	化学反応率
prod	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による生成率
loss	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による消滅係数
list	I	*	W	計算領域
ln	I	*	W	計算領域
trop	I	nlon, nlat, nlev	I	対流圏フラグ
ibcbtm	I	-	I	地表境界条件
ibctop	I	-	I	大気上端境界条件

surf	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での体積混合比
flxbtm	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表でのフラックス
drydep	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での沈着速度
top	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端での体積混合比
flxtop	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端でのフラックス
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	数密度
ef	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	体積混合比
tmp	R*8	*	W	計算領域

戻り値：

なし

機能：

dynam をコールして連続の式を解き、水素化合物およびメタン関連化合物の数密度及び体積混合比を求める。

呼び出しルーチン：

dynam

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：slvnoy

ファイル名：slvnoy.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
nchm	I	-	I	化学反応種類数
ndis	I	-	I	光解離種類数
lmd	R*8	nlon	I	セル中心の経度
lmdu	R*8	nlon	I	セル境界の経度
dlmd	R*8	-	I	経度の間隔
phi	R*8	nlat	I	セル中心の緯度
phiv	R*8	nlat+1	I	セル境界の緯度
dphi	R*8	-	I	緯度の間隔
zet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度
zetw	R*8	nlev+1	I	セル境界の対数気圧高度
dzet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度の間隔
dzetw	R*8	nlev	I	セル境界の対数気圧高度の間隔
dt	R*8	-	I	時間増分
u	R*8	nlon, nlat, nlev	I	東西風速
v	R*8	nlon, nlat+1, nlev	I	南北風速
w	R*8	nlon, nlat, nlev+1	I	鉛直風速
pdJ	R*8	nlon, nlat, nlev, ndis	I	光解離係数
dis	R*8	ndis	W	光解離率
crk	R*8	nlon, nlat, nlev, nchm	I	化学反応速度係数
chem	R*8	nchm	I	化学反応率
prod	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による生成率
loss	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による消滅係数
list	I	*	W	計算領域
ln	I	*	W	計算領域
trop	I	nlon, nlat, nlev	I	対流圏フラグ
ibcbtm	I	-	I	地表境界条件
ibctop	I	-	I	大気上端境界条件

surf	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での体積混合比
flxbtm	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表でのフラックス
drydep	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での沈着速度
top	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端での体積混合比
flxtop	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端でのフラックス
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	数密度
ef	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	体積混合比
eNOy	R*8	nlon, nlat, nlev	I	NOy 排出量
tmp	R*8	*	W	計算領域

戻り値：
なし

機能：
dynam をコールして連続の式を解き、窒素化合物の数密度及び体積混合比を求める。

呼び出しルーチン：
dynam

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：slvox

ファイル名：slvox.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
nlev	I	-	I	高度格子点数
nspc	I	-	I	化学種数
nchm	I	-	I	化学反応種類数
ndis	I	-	I	光解離種類数
lmd	R*8	nlon	I	セル中心の経度
lmdu	R*8	nlon	I	セル境界の経度
dlmd	R*8	-	I	経度の間隔
phi	R*8	nlat	I	セル中心の緯度
phiv	R*8	nlat+1	I	セル境界の緯度
dphi	R*8	-	I	緯度の間隔
zet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度
zetw	R*8	nlev+1	I	セル境界の対数気圧高度
dzet	R*8	nlev	I	セル中心の対数気圧高度の間隔
dzetw	R*8	nlev	I	セル境界の対数気圧高度の間隔
dt	R*8	-	I	時間増分
u	R*8	nlon, nlat, nlev	I	東西風速
v	R*8	nlon, nlat+1, nlev	I	南北風速
w	R*8	nlon, nlat, nlev+1	I	鉛直風速
pdJ	R*8	nlon, nlat, nlev, ndis	I	光解離係数
dis	R*8	ndis	W	光解離率
crk	R*8	nlon, nlat, nlev, nchm	I	化学反応速度係数
chem	R*8	nchm	I	化学反応率
prod	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による生成率
loss	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	I	化学反応による消滅係数
list	I	*	W	計算領域
ln	I	*	W	計算領域
trop	I	nlon, nlat, nlev	I	対流圏フラグ
ibcbtm	I	-	I	地表境界条件
ibctop	I	-	I	大気上端境界条件

surf	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での体積混合比
flxbtm	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表でのフラックス
drydep	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	地表での沈着速度
top	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端での体積混合比
flxtop	R*8	nlon, nlat, 0:nspc	I	大気上端でのフラックス
en	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	数密度
ef	R*8	nlon, nlat, nlev, 0:nspc	O	体積混合比
tmp	R*8	*	W	計算領域

戻り値：

なし

機能：

dynam をコールして連続の式を解き、オゾン、酸素原子など奇数酸素の数密度及び体積混合比を求める。

呼び出しルーチン：

dynam

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：smoo2s

ファイル名：smoo2s.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
smhcoe	R*8	-	I	緯度・経度方向の粘性係数
smvcoe	R*8	-	I	高度方向の粘性係数
dtb	R*8	-	I	CUL 法のタイプステップ
ni	I	-	I	経度格子点数+3
nj	I	-	I	緯度格子点数+3
nk	I	-	I	高度格子点数
s	R*8	0:ni, 0:nj, nk	I	任意のスカラー量
sf	R*8	2:ni-2, 2:nj-2, nk	O	粘性付加後の任意のスカラー量

戻り値：

なし

機能：

2次精度の数値粘性を、CUL法で求められた移流後の任意のスカラー量に付加する。

呼び出しルーチン：

なし

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：sza

ファイル名：sza.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
nlon	I	-	I	経度格子点数
nlat	I	-	I	緯度格子点数
lmd	R*8	nlon	I	セル中心の経度
phi	R*8	nlat	I	セル中心の緯度
iyр	I	-	I	年
imo	I	-	I	月
idy	I	-	I	日
ihr	I	-	I	時
imi	I	-	I	分
cosx	R*8	nlon, nlat	O	太陽天頂角の余弦

戻り値：

なし

機能：

指定された時刻（世界標準時）における各格子点での太陽天頂角の余弦（コサイン）を求める。

呼び出しルーチン：

なし

関数・サブルーチン リスト

型 : LOGICAL 名称 : timchk

ファイル名 : timchk.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
iyр	I	-	I	年
imo	I	-	I	月
idy	I	-	I	日
ihr	I	-	I	時
imi	I	-	I	分

戻り値 :

なし

機能 :

入力された時刻が正しいかどうかをチェックする。

呼び出しルーチン :

montly

関数・サブルーチン リスト

型 : SUBROUTINE 名称 : timinc

ファイル名 : timinc.f

引数 :

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
iyр	I	-	I	現在の年
imo	I	-	I	現在の月
idy	I	-	I	現在の日にち
ihr	I	-	I	現在の時間
imi	I	-	I	現在の分
dtim	I	-	I	時間増分 [分]
iyр1	I	-	O	更新した年
imo1	I	-	O	更新した月
idy1	I	-	O	更新した日にち
ihr1	I	-	O	更新した時間
imi1	I	-	O	更新した分

戻り値 :

なし

機能 :

現在の時刻を時間増分だけ進めるプログラム。閏年や時間増分が大きい場合にも対応している。

呼び出しルーチン :

monthly

関数・サブルーチン リスト

型：SUBROUTINE 名称：vculs

ファイル名：vculs.f

引数：

仮引数	型	寸法	I/O	内 容
dtb	R*8	-	I	CUL 法のタイムステップ
ni	I	-	I	経度格子点数+3
nj	I	-	I	経度格子点数+3
nk	I	-	I	高度格子点数
dz	R*8	nk	I	高度格子点幅
wp	R*8	2:ni-2, 2:nj-2, nk+1	I	高度方向の風速
sp	R*8	2:ni-2, 2:nj-2, nk	I	鉛直移流前の任意のスカラー量
sf	R*8	2:ni-2, 2:nj-2, nk	O	鉛直移流後の任意のスカラー量

戻り値：

なし

機能：

鉛直方向に、任意のスカラー量に対して、CUL 法による移流の計算をする。

呼び出しルーチン：

なし

禁無断転載

システム開発 19-F-3

気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる
予測計算の開発に関するフィージビリティスタディ
報告書

平成20年3月

作成 財団法人 機械システム振興協会
〒108-0073
東京都港区三田一丁目4番28号
電話 03-3454-1311

委託先 財団法人 航空機国際共同開発促進基金
〒105-0001
東京都港区虎ノ門三丁目6番2号
(第2秋山ビルディング)
電話 03-3432-8361

気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる
予測計算の開発に関するフーズビリティスタディ
報 告 書

— 要 旨 —

平成20年3月

財団法人 機械システム振興協会
委託先 財団法人 航空機国際共同開発促進基金



この事業は、競輪の補助金を受けて実施したものです。

<http://ringring-keirin.jp/>



目 次

序

はじめに

1	スタディの目的	1
2	スタディの実施体制	3
3	スタディ成果の要約	6
3.1	化学輸送モデルの試作	6
3.1.1	モデルの仕様	6
3.1.2	作業内容	17
3.1.3	気象データの収集・整理	25
3.1.4	モデルの検証	27
3.1.5	海外調査の成果	44
3.2	境界値データベースの作成	46
3.2.1	データ仕様	46
3.2.2	収集したデータ	48
4	スタディの成果	49
5	スタディの今後の課題および展開	53
[資料編]		
参考資料—1	参考文献	54
参考資料—2	用語集	55

序

わが国経済の安定成長への推進にあたり、機械情報産業をめぐる経済的、社会的諸条件は急速な変化を見せており、社会生活における環境、都市、防災、住宅、福祉、教育等、直面する問題の解決を図るためには技術開発力の強化に加えて、多様化、高度化する社会的ニーズに適応する機械情報システムの研究開発が必要であります。

このような社会情勢の変化に対応するため、財団法人機械システム振興協会では、財団法人日本自転車振興会から機械工業振興資金の交付を受けて、システム技術開発調査研究事業、システム開発事業、新機械システム普及促進事業を実施しております。

このうち、システム技術開発調査研究事業及びシステム開発事業については、当協会に総合システム調査開発委員会(委員長：東京大学名誉教授 藤正 巖氏)を設置し、同委員会のご指導のもとに推進しております。

本「気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる予測計算の開発に関するフィージビリティスタディ」は、上記事業の一環として、当協会が財団法人航空機国際共同開発促進基金に委託し、実施した成果をまとめたもので、関係諸分野の皆様方のお役に立てれば幸いです。

平成20年3月

財団法人 機械システム振興協会

はじめに

財団法人航空機国際共同開発促進基金は、平成19年度研究開発の一つとして、財団法人日本自転車振興会の機械工業振興資金の交付を受けた、財団法人機械システム振興協会からの受託事業「気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる予測計算の開発に関するフィージビリティスタディ」を実施した。本報告書は、その研究開発報告書である。

人間の社会経済活動に伴う大気組成の変動が気候に影響を与える、いわゆる地球温暖化の問題に対して、京都議定書が発効し、世界規模で地球温暖化防止に取り組む枠組みが作られ、その活動が本格化している。

地球温暖化の問題とは、大気中の微量化学成分のうち、二酸化炭素(CO₂)、水蒸気(H₂O)、メタン(CH₄)、亜酸化窒素(N₂O)、オゾン(O₃)等のいわゆる温室効果気体が地表および大気からの赤外線放射を吸収するため、その増加に伴って地表付近の気温が上昇することである。

大型精密機器システムにはこのような問題が内在し、特に、その代表である航空機のエンジン排気には、二酸化炭素、水蒸気が含まれているので、これらは地球温暖化に影響する。また、エンジン排気に含まれる窒素酸化物(NO_x)は、亜音速機が飛行する高度10km程度の対流圏では、大気中の光化学反応によって温室効果気体であるオゾンを生成し、温暖化を促進させる。

一方、次世代の超高速輸送機と期待される超音速航空機は、高空を飛行する際、エンジン排気を直接成層圏(高度20kmほどの高高度)に排出するため、その中の窒素酸化物がオゾン層に著しい影響を与えることが指摘されている。このときの最大の問題点は、成層圏における窒素酸化物はオゾンを減少させ、太陽からの有害な紫外光に対する防衛が弱まり、人体に悪影響を与えることである。

このため本スタディでは、これまでの次世代航空機等開発調査(超音速輸送機開発調査)に係わる環境影響調査、「大型精密機器システムが地球温暖化に及ぼす影響予測の化学輸送モデル開発に関する調査研究」及び「気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる予測計算の高精度・高次元化に関する調査研究」において実施してきた技術をベースに、特に機械システムと深い関係を有する航空機産業が、地球温暖化問題に適確に対応することにより、航空機の国際共同開発の促進に寄与するとともに、機械システムの振興に寄与することを目的とし、「気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる予測計算の開発に関するフィージビリティスタディ」を実施した。

実施に際しては、当基金内に「化学輸送モデル開発調査委員会」を設け、その委員会において開発方針・内容等を確認しつつ、研究開発を実施した。

この研究開発にあたっては、事業の実現と推進にご尽力を賜った経済産業省および財団法人日本自転車振興会ならびに財団法人機械システム振興協会の関係者各位に厚く御礼申し上げます。

平成20年3月

財団法人 航空機国際共同開発促進基金
会 長 佐々木 元

1. スタディの目的

人間の社会経済活動に伴う大気組成の変動が気候に影響を与える、いわゆる地球温暖化の問題に対して、世界的な取り組みが本格化している。地球温暖化の問題とは、大気中の微量化学成分のうち、二酸化炭素（CO₂）、水蒸気（H₂O）、メタン（CH₄）、亜酸化窒素（N₂O）、オゾン（O₃）等のいわゆる温室効果気体が地表及び大気からの赤外線放射を吸収するため、その増加に伴って地表付近の気温が上昇することである。近年、この問題の重要性が指摘され、社会的な関心が高まっている。

機械システムの一つである航空機のエンジン排気には二酸化炭素が含まれており、地球温暖化に影響する。また、エンジン排気に含まれる窒素酸化物（NO_x）は、亜音速機が飛行する高度10km程度対流圏では、大気中の光化学反応によって温室効果気体であるオゾンを生成し、温暖化を促進させる。

航空機のエンジン排気が環境に与える影響は小さくない。空港周辺の大気質への影響を抑えるための排出ガスの規制は、1998年に開催された国際民間航空機構（ICAO）の第4回航空機環境保全委員会（CAEP4）で排出基準が16%強化された後、2004年の第6回航空機環境保全委員会（CAEP6）においてもさらに規制が強化された。

また、巡航時の排出ガスについても、大気微量成分や雲の生成を通じて気候変動に影響を与えることが懸念されることから、規制を設けることがCAEPで検討されている。

一方、次世代の超高速輸送機と期待される超音速航空機は、高空を飛行する際、エンジン排気を直接成層圏（高度20kmほどの高い高度）に排出するため、その中の窒素酸化物がオゾン層に著しい影響を与えることが指摘されている。このときの最大の問題点は、成層圏における窒素酸化物はオゾンを減少させ、太陽からの有害な紫外光に対する防禦が弱まり、人体に悪影響を与えることである。

このような状況下にあって、エンジン排気が環境に与える影響を正確に予測することが必須である。現在では、民間航空機の開発・生産は国際共同事業が趨勢であり、今後我が国が国際共同事業において主体的立場を確保し、戦略的産業である航空機産業の振興、ひいては機械システムの振興に資するには、航空機の技術開発とともに、航空機が地球温暖化に及ぼす影響を予測するための世界と対等以上の技術を保有することが必要である。その一つは、上記問題に対処し得る化学輸送モデルの完成である。

地球温暖化の程度を評価するためには、気候モデル（いわゆる気象予報の数値計算モデル）が用いられる。気候モデルでは、これら温室効果気体の濃度は既知なものとして外部から与えるのが普通である。しかし、現実の大気中では、オゾンやメタンなどは光化学反応によって生成・消滅し、その反応速度は気温によって変わるため、温暖化が進んだ状態ではその時の気温によって反応速度を計算し、生成気体成分の濃度を計算する必要がある。

また、これらの温室効果気体の多くは反応時定数が長いため、気候が変わるとそれによって濃度分布が変わる可能性もある。これらの効果も含めて温暖化予測を行うためには、大気中の光化学反応と風による物質輸送を模擬し、各成分ごとの連続の式を解く化学輸送モデルを用いて、気候モデルと結合させた計算を行うことが不可欠である。

化学輸送モデルについては、我が国が独自で開発した2次元化学輸送モデル（成層圏オゾンの緯度・高度分布を予測するモデル）や、公開されているマックス・プランク気象研究所のMOZART等があるが、成層圏・対流圏の両方を対象とする3次元化学輸送モデルは、世界的にみて未だ研究段階で、実用化にいたっていない。

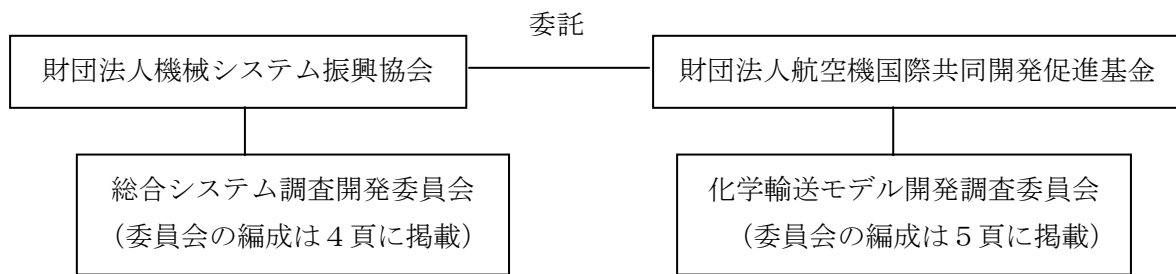
以上のような背景に基づき、本スタディの目的と効果を次のように設定する。

- (1) 対流圏及び成層圏における亜音速航空機と超音速航空機（超高速機）による温室効果気体の影響を調査し得る化学輸送モデルの開発調査を行う。すなわち、航空機エンジン排気による対流圏オゾンの増加は、二酸化炭素の増加とは違って、地球上の場所と時間で著しく異なる（航空機が頻繁に飛ぶ高度と経路でオゾンの増加が大きい）ので、成層圏における窒素酸化物とオゾンの反応によるオゾンの減少も含めて、それらを正確に把握できる化学輸送モデルを開発し、オゾン変化量の全地球的分布を計算することが必要である。
- (2) 化学輸送モデルの開発調査は、亜音速機の開発に対して次の効果を有する。
 - ・当該モデルにより、航空機が排出する各種物質の環境への具体的影響度を明らかにすることにより、今後、航空機エンジン排気、及び航空機運用方法に対する環境基準の設定・改訂にあたって、主導的な役割を果たすことができること。
 - ・現在行われている「環境適応型小型航空機用エンジン開発」を始め、今後開発されるエンジン並びに航空機の設計に際して、環境影響度の事前検証に当該モデルによる解析が有効に活用されること。
- (3) 将来、超音速航空機（超高速機）の国際共同開発にあたっては、亜音速機とは異なった高度、運用形態で飛行するため、さらなる評価、環境基準制定が必要となり、本「化学輸送モデル開発調査」の成果を有効に活用した影響評価が必須である。
- (4) 化学輸送モデル開発調査では、窒素酸化物等の温室効果気体を含む数10種類の物質の濃度を精度良く計算できる数値モデルを検討するので、航空機のみならず、機械全般が排出する物質の影響をも予測可能であり、機械システムの性能向上にも寄与し得る。

以上のことから、本スタディにおける成果は、航空機の国際共同開発において、国際的に先導的な日本の能力を与え得るものとなる。

2. スタディの実施体制

財団法人機械システム振興協会に「総合システム調査開発委員会」を、財団法人航空機国際共同開発促進基金に「化学輸送モデル開発調査委員会」を設置し、その委員会において研究開発方針・内容等を確認しつつ、スタディを実施した。



総合システム調査開発委員会委員名簿

(順不同・敬称略)

委員長	東京大学 名誉教授	藤 正 巖
委 員	埼玉大学 総合研究機構 地域共同研究センター 教授	太 田 公 廣
委 員	独立行政法人産業技術総合研究所 エレクトロニクス研究部門 副研究部門長	金 丸 正 剛
委 員	独立行政法人産業技術総合研究所 産学官連携推進部門 産学官連携コーディネータ	志 村 洋 文
委 員	東北大学大学院 工学研究科 教授 (未来科学技術共同研究センター長)	中 島 一 郎
委 員	東京工業大学大学院 総合理工学研究科 教授	廣 田 薫
委 員	東京大学大学院 工学系研究科 准教授	藤 岡 健 彦
委 員	東京大学大学院 新領域創成科学研究科 教授 (副研究科長)	大 和 裕 幸

「化学輸送モデル開発調査委員会」

平成19年度委員名簿

No.	区分	氏名(敬称略)	所属・役職
1	委員長	久保田 弘敏	帝京大学 理工学部 航空宇宙工学科 教授 (東京大学名誉教授)
2	委員	小川 利紘	独立行政法人 宇宙航空研究開発機構 主幹研究員 (東京大学名誉教授)
3		田丸 卓	独立行政法人 宇宙航空研究開発機構 主任研究員
4		林 茂	独立行政法人 宇宙航空研究開発機構 航空プログラムグループ 環境適応エンジンチーム長
5		津江 光洋	東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻 教授
6		加茂 圭介	富士重工業(株) 航空宇宙カンパニー 企画管理部 主管
7		高見 光	三菱重工業(株) 名古屋航空宇宙システム製作所 民間機技術部 基礎設計課 主席
8		葉山 賢司	川崎重工業(株) 航空宇宙カンパニー 技術本部 研究部 空力技術課 上級専門職
9		廣光 永兆	石川島播磨重工業(株) 航空宇宙事業本部 技術開発センター 要素技術部 燃焼グループ 主査
10		杉浦 重泰	航空技術&ビジネス・コンサルタント
11		末永 民樹	(株) JAL エアロ・コンサルティング 主席コンサルタント
12	吉田 修	(株) 日本航空インターナショナル地球環境部 部長	
13	オブザーバー	畑田 浩之	経済産業省 製造産業局 航空機武器宇宙産業課 課長補佐
14		柳田 晃	(社) 日本航空宇宙工業会 技術部部長
15		津田 直士	(財) 日本航空機開発協会 第二企画室 超高速機グループリーダー
16	事務局	高岡 武司	(財) 航空機国際共同開発促進基金 常務理事
17		松崎 博樹	(財) 航空機国際共同開発促進基金 企画調査部長
18		中西 俊仁	(財) 航空機国際共同開発促進基金 企画調査部 部長代理
19		松園 正	(財) 航空機国際共同開発促進基金 企画調査部 部付
20		榊原 篤志	(財) 航空機国際共同開発促進基金 企画調査部 部付

3 スタディ成果の要約

3.1 化学輸送モデルの試作

平成 18 年度に開発した 3 次元物質輸送モデルに化学反応を組み込み、3 次元化学輸送モデルの試作品を作成する。作成したモデルを用いて、オゾン等の化学種の濃度分布について計算を実施し、計算が発散したり、数値拡散を起こしたり、不自然な分布になったりしないかどうか確認する。また、実用的な速度で計算できるかどうかを検証する。さらに、計算結果を NASA の「モデルと観測ワークショップ II」の報告書¹⁾等にまとめられている観測値や他のモデルの計算値と比較し、どの程度一致するかを検証する。

3.1.1 モデルの仕様

今年度開発する 3 次元化学輸送モデルのプロトタイプ仕様を以下に示す（3 次元化学輸送モデル開発計画全体については表 3.1.1-1 参照）。

(1) プログラムの仕様

3 次元化学輸送モデルは、大気中の光化学反応及び輸送過程を模擬した計算を行うことで、微量成分の濃度（体積混合比または数密度）を緯度・経度・気圧（高度に相当）の 3 次元的な分布として算出する計算機プログラムである。

① 基本方程式

全球大気中の微量成分の濃度を計算するため、化学種の反応を考慮した物質の「連続の式」（球面座標系）を用いる。鉛直座標については対数気圧座標系とし、鉛直風速も気圧単位で表示されたものを用いる。

$$\frac{df_i}{dt} + \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} (f_i u) + \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} (f_i v \cos \varphi) + e^\zeta \frac{\partial}{\partial \zeta} (f_i w e^{-\zeta}) = \frac{P_i}{n_0} - L_i f_i \quad (3.1.1-1)$$

(λ, φ, ζ): 経度・緯度・対数気圧 ($\zeta = H \log_{10}(p_0/p)$, $p_0 = 1000 \text{hPa}$, $H = 16 \text{km}$)

(u, v, w): 風速 ($w = \frac{d\zeta}{dt} = -\frac{H}{\log_{10} p} \omega$ 。ここで ω は気圧座標における鉛直風速で $\omega = \frac{dp}{dt}$)

a : 地球の半径

f_i : 化学種 i の体積混合比 [未知変数]

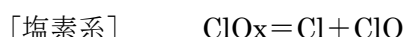
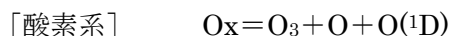
P_i : 光解離を含む諸反応による化学種 i の生成率

L_i : 諸反応による化学種 i の消滅係数

n_0 : 大気分子の数密度

② 取り扱う化学種

表 3.1.1-2 に掲げる化学種を計算対象とする。なお、実際の計算にあたっては、実行時に計算する化学種を選択できるようにする。また、 O_x 、 NO_x 、 HO_x 、 ClO_x 、 BrO_x はファミリーとしてまとめて計算し、各時刻ごとに光化学平衡条件による分配を行う。



安定な化学種である N_2 、 O_2 は、データとして与えるだけで計算は行わない。また、 H_2O については気象データ中の相対湿度から求める。

③ 気象データ

以下のような全球気象解析データを入力できるようにする。

- 水平解像度：2.5° 格子
- 鉛直解像度：15 層 (1000, 925, 850, 700, 500, 400, 300, 250, 200, 150, 100, 70, 50, 30, 10hPa)
- 時間間隔：30 分程度 (但し、時間間隔の長いデータを補間して用いてもよい)
- 気象要素：気温 T 、水平風速(u, v)、鉛直風速 ω 、相対湿度 RH (10hPa 面まで)

上記の仕様を満たす気象データとして、本スタディでは ECMWF の全球気象解析データを使用した。但し、時間間隔は 12 時間であるので、線形補間を行うものとした。

④ 数値解法

数値解法：

- 移流項：CUL (キュービック・ラグランジュ) 法

計算格子：

- 経度方向：144 個 ($\Delta\lambda = 2.5^\circ$)
- 緯度方向：72 個 ($\Delta\phi = 2.5^\circ$)
- 鉛直方向：15 個 (地表から 30km まで、 $\Delta\zeta = 2\text{km}$)
- 鉛直座標：対数気圧座標系
- 定義点：スタガード (staggered) 格子

時間積分：

- 時間増分：30分（実行時に変更可）
- 計算対象期間：気象データがある範囲内で実行時に指定。

⑤ 入力データ

3次元化学輸送モデルの入力データは以下のとおり。

- 初期値ファイル（初期時刻における各化学種の体積混合比）
- 地表境界値ファイル（地表における各化学種の体積混合比またはフラックスまたは沈着速度）
- 上端境界値ファイル（大気上端における各化学種の体積混合比またはフラックス）
- パラメータファイル

このうち、パラメータファイルに含まれるデータは以下のとおり。

- 初期時刻・終了時刻・時間増分
- 化学種ごとの計算方法、初期値ファイル名
- 化学種ごとの地表境界条件、地表境界値ファイル名
- 化学種ごとの上端境界条件、上端境界値ファイル名
- 出力時間間隔
- 化学種ごとの出力スイッチ、出力ファイル名

⑥ 出力データ

パラメータファイル中で指定された化学種の体積混合比または数密度（出力スイッチにより選択）

⑦ 言語

Fortran90を使う。MPIを用いて分散メモリ型の並列化を行う。

今後の拡張性を考慮し、ソースコードを読みやすくする（コメントをつける等）。

(2) 処理アルゴリズム

① 格子点の取り方

緯度、経度ともに 2.5° 刻みのレギュラー格子とする。但し体積混合比 f はセルの中心で定義する。

対象化学種の体積混合比 f の定義点：

経度方向： 1.25° , 3.75° , 6.25° , \dots 178.75° , 181.25° , \dots 356.25° ,
 358.75° の144個 ($\Delta\lambda=2.5^\circ$)

緯度方向： -88.75° , -86.25° , \dots -1.25° , 1.25° , \dots 86.25° , 88.75°

の 72 個 ($\Delta\varphi=2.5^\circ$)

鉛直方向：1km, 3km, 5km, … 27km, 29km の 15 個

② 計算方法

各化学種の濃度の計算方法は、その化学種の反応時定数によって、以下の中から選択した（表 3.1.1-2 参照）。

1. 場所ごとの値を読み込むだけで計算はしない。
2. 光化学平衡で濃度を計算する。

$$f_i = \frac{P_i}{n_0 L_i} \quad ((3.1.1-1) \text{式で右辺} = 0 \text{としたもの})$$

3. 局所的に濃度を時間積分する。

$$f_i^{n+1} = \frac{f_i^n + \frac{P_i}{n_0} \Delta t}{1 + L_i \Delta t} \quad ((3.1.1-1) \text{式で移流項を} 0 \text{としたもの})$$

4. 移流項を含めて濃度を時間積分する（後述）。

但し、ファミリーの化学種についてはファミリー全体を輸送項を含めて時間積分し、ファミリー内については光化学平衡条件を用いて分配を行う。

③ 化学反応の取り扱い

反応速度は以下の方法で計算する。

二体反応の場合： $k n_A n_B$ (k :反応速度係数、 n_A, n_B :物質 A, B の数密度)

三体反応の場合： $k n_A n_B n_M$ (M は反応の第三体)

反応速度係数 k は通常、気温の関数である。これらは、NASA JPL がまとめたデータ (De More *et al.*, 1997) ²⁾ を用いる。

④ 光解離の取り扱い

反応速度は以下の方法で計算する。

$J n_A$ (J :光解離係数)

光解離係数 J は、大気上端における太陽放射のスペクトル強度 Φ_0 と、解離する分子の吸収断面積 σ を用いて、以下の式で計算する。

$$J = \int \sigma \Phi_0 \exp[-\sec \chi \{ \sigma(O_2) S(O_2) + \sigma(O_3) S(O_3) \}] d\lambda \quad (3.1.1-2)$$

ここで、 χ は太陽天頂角、 $S(O_2)$ および $S(O_3)$ はそれぞれ、その高度から大気上端までの O_2 および O_3 分子密度の積分量である。

太陽放射のスペクトル強度 Φ_0 と解離分子の吸収断面積 σ のデータは、NASA JPL がまとめたもの (De More *et al.*, 1997) ²⁾ を用いる。

⑤ 物質輸送の計算方法

セミラグランジュ法の一種であるキュービック・ラグランジュ (CUL) 法を用いる。

セミラグランジュ法とは、ある時刻における全格子点上の流体粒子が、それぞれ時間 Δt だけ前にどこにいたかをバックワード・トラジェクトリー (流跡線) 解析によって算出し、その位置における化学種の濃度を補間によって求めた後、それが当該格子点に来るまでの光化学反応による濃度の時間変化を求めるやり方であり、この手法を用いた化学輸送モデルが開発されるようになってきている。今回開発する化学輸送モデルでは、時間 Δt だけ前の時刻における位置で補間された化学種の濃度に対し、化学反応による生成・消滅分を増減したものが、現在の格子点上における濃度の値となる。

キュービック・ラグランジュ (CUL) 法は、計算格子点を 4 点用い 3 次のラグランジュ補間を形成する、セミラグランジュ法の一つである。計算に用いる 4 点は、計算点と風上の 2 点、風下の 1 点である。

一般にセミラグランジュ法は、 x 軸上の点 x_i での次のタイムステップ (Δt 秒後) の値を求める場合に、 x_i から風上方向に $u\Delta t$ さかのぼった点 (移流原点) の値がそのまま移流してくると考える。この移流原点での値を求める際に、上記の 4 点を通る 3 次多項式によって補間するのが、CUL 法の特徴である。

⑥ 境界条件

a) 経度方向

周期境界条件とする。

b) 緯度方向

セミラグランジュ法で極点付近の移流を取り扱う。

c) 高度方向

地表境界、及び上端境界は、それぞれの化学種の性質を考慮して、

- 体積混合比の分布を与える。
- フラックスの分布を与える。
- 沈着速度の分布を与える。

の中から、表 3.1.1-2 のように選択した。

(3) 性能

① 計算速度

ヒューレット・パッカード社 (以下、HP 社という) 製 ProLiant DL380 G5 (Intel Xeon 5160, 3.0GHz) (以下、DL380 という) にて、対象化学種 (80 種) の 1 日分 ($\Delta t=20$ 分) の濃度計算が、CPU 時間 92 分以内に完了すること。なお、DL380 の

SPECfp_base2006 の値は 18.3 である。

これは、実際の予測計算を考慮し、80 種の化学種についての 5 年分の予測計算を、8 個の CPU を持つ並列計算機で 1 ヶ月以内に行うために必要な計算速度である。

② 精度

オゾン等の化学種の濃度分布についての計算結果が、NASA の「モデルと観測ワークショップⅡ」の報告書¹⁾等にまとめられている観測値や他のモデルの計算値と比べて妥当な結果が出力されること（各モデルのばらつきの範囲内であること）。

(4) その他

① 拡張性

今後、積雲対流による拡散や湿性沈着過程などの諸過程を追加していくこと等を考慮し、拡張性のある設計とすること。

② 文書化

ユーザが使用するための利用マニュアル、モデルの拡張・修正時に参照できる設計書を添付すること。

表 3.1.1-1 3次元化学輸送モデル開発計画

	IADF 2次元成層圏モデル	H18年度プロトタイプ	H19年度プロトタイプ	完成モデル
計算領域	緯度：90° N～90° S 高度：0～50km	<u>経度：180° E～180° W</u> 緯度：90° N～90° S 高度：0～50km	経度：180° E～180° W 緯度：90° N～90° S 高度：0～50km	経度：180° E～180° W 緯度：90° N～90° S 高度：0～50km
化学種数	55	1	<u>約 80</u>	約 80
化学反応	150 (成層圏化学中心)	なし	<u>約 250 (成層圏+対流圏)</u>	約 250 (成層圏+対流圏)
光解離係数	○太陽放射強度から直接計算	なし	○太陽放射強度から直接計算	○太陽放射強度から直接計算
積雲対流	×	×	×	○
境界層	×	×	×	○
乾性沈着	×	<u>○</u>	○	○
雲放射	×	×	×	○
湿性沈着	×	×	×	○
気象データ	気候値 (残差循環)	ECMWF (または JMA) 解析データ	ECMWF (または JMA) 解析データ	任意 (前処理により NetCDF 化)
数値解法	反復風上差分	<u>セミラグランジュ法</u>	<u>CUL法</u>	CUL法
並列化対応	×	<u>○ (共有メモリ)</u>	<u>○ (MPI)</u>	○ (MPI)
初期化	×	×	×	○
データ同化	×	×	×	○

(注)○：実装されている、×：実装されていない。下線箇所が当該年度に開発する部分。

表 3.1.1-2 3次元化学輸送モデルが取り扱う化学種

計算順序	化学種	計算方法	地表境界条件	上端境界条件
1	O _x	連続の式	沈着速度	フラックス
2	O ₃	ファミリー	—	—
3	O	ファミリー	—	—
4	O(¹ D)	ファミリー	—	—
5	N ₂ O	連続の式	濃度	フラックス
6	NO _y	連続の式	濃度	フラックス
7	N	光化学平衡	濃度	フラックス
8	NO _x	連続の式	沈着速度	フラックス
9	NO	ファミリー	—	—
10	NO ₂	ファミリー	—	—
11	NO ₃	連続の式	濃度	フラックス
12	HNO ₃	連続の式	沈着速度	フラックス
13	HO ₂ NO ₂	連続の式	沈着速度	フラックス
14	N ₂ O ₅	連続の式	濃度	フラックス
15	HONO	連続の式	濃度	フラックス
16	CH ₄	連続の式	濃度	フラックス
17	CH ₃	光化学平衡	濃度	フラックス
18	CH ₃ O ₂	連続の式	濃度	フラックス
19	CH ₃ OOH	連続の式	濃度	フラックス
20	CH ₃ O	連続の式	濃度	フラックス
21	CH ₂ O	連続の式	濃度	フラックス
22	CHO	光化学平衡	濃度	フラックス
23	CO	連続の式	沈着速度	フラックス
24	HO _x	連続の式	沈着速度	フラックス
25	OH	ファミリー	—	—
26	HO ₂	ファミリー	—	—
27	H	ファミリー	—	—
28	H ₂ O ₂	連続の式	沈着速度	フラックス
29	C ₃ H ₆	局所積分	濃度	フラックス
30	ISOP (C ₅ H ₈)	局所積分	濃度	フラックス
31	PO ₂ (C ₃ H ₆ OHO ₂)	局所積分	濃度	フラックス
32	CH ₃ CHO	局所積分	濃度	フラックス

計算順序	化学種	計算方法	地表境界条件	上端境界条件
33	POOH (C ₃ H ₆ OHOOH)	局所積分	濃度	フラックス
34	CH ₃ CO ₃	局所積分	濃度	フラックス
35	CH ₃ COOOH	局所積分	濃度	フラックス
36	PAN (CH ₃ CO ₃ NO ₂)	局所積分	沈着速度	フラックス
37	ONIT (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OHNO)	局所積分	濃度	フラックス
38	C ₂ H ₆	局所積分	濃度	フラックス
39	C ₂ H ₄	局所積分	濃度	フラックス
40	C ₄ H ₁₀	局所積分	濃度	フラックス
41	MPAN (CH ₂ CCH ₃ CO ₃ NO ₂)	局所積分	濃度	フラックス
42	ISOPO ₂ (HOCH ₂ COOCH ₃ CHCH ₂)	局所積分	濃度	フラックス
43	MVK (CH ₂ CHCOCH ₃)	局所積分	濃度	フラックス
44	MACR (CH ₂ CCH ₃ CHO)	局所積分	濃度	フラックス
45	MACRO ₂ (CH ₃ COCHO ₂ CH ₂ OH)	局所積分	濃度	フラックス
46	MACROOH (CH ₃ COCHOOHCH ₂ OH)	局所積分	濃度	フラックス
47	MCO ₃ (CH ₂ CCH ₃ CO ₃)	局所積分	濃度	フラックス
48	C ₂ H ₅ O ₂	局所積分	濃度	フラックス
49	C ₂ H ₅ OOH	局所積分	濃度	フラックス
50	C ₁₀ H ₁₆	局所積分	濃度	フラックス
51	C ₃ H ₈	局所積分	濃度	フラックス
52	C ₃ H ₇ O ₂	局所積分	濃度	フラックス
53	C ₃ H ₇ OOH	局所積分	濃度	フラックス
54	CH ₃ COCH ₃	局所積分	濃度	フラックス
55	ROOH (CH ₃ COCH ₂ OOH)	局所積分	濃度	フラックス
56	CH ₃ OH	局所積分	沈着速度	フラックス
57	C ₂ H ₅ OH	局所積分	沈着速度	フラックス
58	GLYALD (HOCH ₂ CHO)	局所積分	濃度	フラックス
59	HYAC (CH ₃ COCH ₂ OH)	局所積分	濃度	フラックス
60	EO ₂ (HOCH ₂ CH ₂ O ₂)	局所積分	濃度	フラックス
61	EO (HOCH ₂ CH ₂ O)	局所積分	濃度	フラックス

計算順序	化学種	計算方法	地表境界条件	上端境界条件
62	HYDRALD (HOCH ₂ CCH ₃ CHCHO)	局所積分	濃度	フラックス
63	RO ₂ (CH ₃ COCH ₂ O ₂)	局所積分	濃度	フラックス
64	CH ₃ COCHO	局所積分	濃度	フラックス
65	ISOPNO ₃ (CH ₂ CHCCH ₃ OOCH ₂ ONO ₂)	局所積分	濃度	フラックス
66	ONITR (CH ₂ CCH ₃ CHONO ₂ CH ₂ OH)	局所積分	濃度	フラックス
67	XO ₂ (HOCH ₂ COOCH ₃ CHCHOH)	局所積分	濃度	フラックス
68	XOOH (HOCH ₂ COOHCH ₃ CHCHOH)	局所積分	濃度	フラックス
69	ISOPOOH (HOCH ₂ COOHCH ₃ CHCH ₂)	局所積分	濃度	フラックス
70	H ₂	連続の式	濃度	フラックス
71	CH ₃ Cl	連続の式	濃度	フラックス
72	CCl ₄	連続の式	濃度	フラックス
73	CF ₃ Cl	連続の式	濃度	フラックス
74	CF ₂ Cl ₂	連続の式	濃度	フラックス
75	CH ₃ CCl ₃	連続の式	濃度	フラックス
76	ClO _x	連続の式	沈着速度	フラックス
77	Cl	ファミリー	—	—
78	ClO	ファミリー	—	—
79	HCl	連続の式	濃度	フラックス
80	HOCl	連続の式	濃度	フラックス
81	ClONO ₂	連続の式	濃度	フラックス
82	Cl ₂	連続の式	濃度	フラックス
83	OCIO	連続の式	濃度	フラックス
84	Cl ₂ O ₂	連続の式	濃度	フラックス
85	ClNO ₂	連続の式	濃度	フラックス
86	CH ₃ Br	連続の式	濃度	フラックス
87	BrO _x	連続の式	沈着速度	フラックス
88	Br	ファミリー	—	—
89	BrO	ファミリー	—	—

計算順序	化学種	計算方法	地表境界条件	上端境界条件
90	HBr	連続の式	濃度	フラックス
91	HOBr	連続の式	濃度	フラックス
92	BrONO ₂	連続の式	濃度	フラックス
93	BrCl	連続の式	濃度	フラックス

3.1.2 作業内容

(1) キュービックラグランジュ (CUL) 法

① セミラグランジュ法

図 3.1.2-1 のように x 方向に速度 u で移流する一次元のプロファイル F について考える。

X 軸上での点 x_i での次のタイムステップ (Δt 秒後) の値を求める場合に、 x_i から風上方向に $u\Delta t$ だけさかのぼった点 (移流原点) の値がそのまま移流してくるという考えがセミ・ラグランジュ法の考え方である。つまり、

$$F(x_i, t+\Delta t) = F(x_i - u\Delta t, t) \quad (3.1.2-1)$$

が成立する。簡単にするため、移流速度が一定であると仮定すると、移流項は解析的に解くことが可能になり、式(3.1.2-1)は

$$F(x_i, t+\Delta t) = F(x_i - u\Delta t, 0) \quad (3.1.2-2)$$

と書くことができる。速度が時間や空間に依存している場合でも、 Δt が非常に小さいという仮定のもとで、式(3.1.2-1)は成立する。つまり、計算対象点 x_i での Δt 秒後の値 $F(x_i, t+\Delta t)$ を求めるためには、今の時刻での移流原点における値 $F(x_i - u\Delta t, t)$ を求めればよいということになる。

② CUL 法

CUL 法は、従属変数として物理量のみを持ち、計算格子点を 4 点用いて 3 次のラグランジュ補間を形成する、セミ・ラグランジュ法の一つである (図 3.1.2-2)。計算に用いる 4 点は、計算点と風上の 2 点、風下の 1 点である。

図 3.1.2-2 のように移流速度が正の場合、計算点での物理量の値 f_i および風上の 2 点 f_{i-1} 、 f_{i-2} と風下の 1 点 f_{i+1} から、以下のような 3 次補間関数を、 f_i を基準に形成する。

$$F(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d \quad (3.1.2-3)$$

この補間関数に、適合条件

$$F(\Delta x) = f_{i+1}$$

$$F(0) = f_i$$

$$F(-\Delta x) = f_{i-1}$$

$$F(-2\Delta x) = f_{i-2}$$

を代入して解くと、

$$a = (f_{i+1} - 3f_i + 3f_{i-1} - f_{i-2})/6\Delta x^3 \quad (3.1.2-4)$$

$$b = (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})/2\Delta x^2 \quad (3.1.2-5)$$

$$c = (2f_{i+1} + 3f_i - 6f_{i-1} + f_{i-2})/6\Delta x \quad (3.1.2-6)$$

$$d = f_i \quad (3.1.2-7)$$

のように係数が決まる。この補間関数から移流原点を求めることで、次のタイムステップでの値を求めることができる。移流原点の値は、式(3.1.2-3)と $\xi = u\Delta t$ を用いることで、

$$F(x_i, t+\Delta t) = a\xi^3 + b\xi^2 + c\xi + d \quad (3.1.2-8)$$

と求めることができる。

次に、多次元 CUL 法について考える。多次元問題に対しては、1次元 CUL 法を多数回適用することで移流原点を求める。方法はいくつかあるが、ここでは x 方向→ y 方向→ z 方向の順序で補間を行う場合を考える。このとき CUL 法では物理量のみを用いるので、最終的には z 方向に 4 点が必要となる。そのためには、 y 方向で 4 回の 1次元 CUL 法を行う必要があり、さらにそのためには 16 点が必要となる。そこでまず、16 回の 1次元 CUL 法を行い、そこで求めた 16 点を用いて y 方向に 4 回補間する。最後に y 方向の補間により求めた 4 点を用いて z 方向に 1 回補間を行い、移流原点を求めることになる。

さらに、方向分離の補間方法を行うことを考える。方向分離とは、 x 方向→ y 方向→ z 方向と一度に行なっている補間を、まず x 方向→ y 方向の補間を全点に対して行い、最後に z 方向の補間を行う方法である。

図 3.1.2-3 に示されているように、水平方向での移流原点を求めるため、16 点を用い x 方向に 4 回の 1次元補間を行い、そこで求めた赤で記された 4 点を用いて y 方向に 1 回補間を行う。これで $F(i, j, k)$ に対する移流原点 $F^*(i, j, k)$ が求まり、計算領域全点に対し $F^*(i, j, k)$ を求める。その後求めた $F^*(i, j, k)$ を用いて再び全点に対して z 方向への補間を行う。これにより、これまで 21 回行っていた補間回数を、方向分離により 6 回に減らすことが可能となる。本モデルでは、水平方向の格子間隔が鉛直方向の格子間隔に比べて非常に大きいため、方向分離の方法を用いても問題にならない。

(2) CUL 法の導入実験

CUL 法の導入にあたり、予備的な実験を行った。初期状態において、直角座標平面上に円錐状の濃度分布を置き (図 3.1.2-4 参照)、 x 軸方向に一様な風が吹いた場合の濃度変化の計算を、CUL 法と風上差分法の 2 通りの方法で行った。計算結果を図 3.1.2-5(a)に示す。

- 風上差分法では、数値拡散が発生し、濃度のピークが時間とともに低くなるのに対し、CUL 法ではピークの低下が小さい。
- CUL 法では、周囲に波状の構造が発生する。但し、この波の振幅が成長することはない。

このような波が発生すると、計算値が負になることがある。これを 0 もしくは微小な正

の値で置き換えることで補正すれば、質量保存則が成り立たなくなってしまうので、できる限りその振幅が小さくなることを望ましい。

そこで、CUL 法に、 10^{-4}s^{-1} 程度の人工的な数値粘性を付加することで、上記のような波の発生を抑えることを試みた。

単純な CUL 法と数値粘性付き CUL 法の 2 通りの方法で行った結果を比較したものが図 3.1.2-5(b)である。

- 数値粘性を加えることにより濃度値が負になる部分が大幅に減少した。負の濃度値を 0 で置き換えても、質量保存則からのずれは小さく抑えられる。
- 数値粘性によるピーク値の低下は見られるが、風上差分法によるそれに比べ小幅に抑えることができる。

この結果より、3次元化学輸送モデルの輸送スキームとして数値粘性付き CUL 法を導入することとした。

(3) CUL 法の実装

気象データを読み込んで、風による物質の移動と光化学反応を模擬し、化学種の分布を算出する 3次元化学輸送モデルを作成した。

CUL 法導入に際しては、広域的なプログラムの書き換えによるバグの混入を防ぐため、輸送過程計算ルーチン `dynam` 以下を置き換える形で導入した。

また、極付近で計算格子が密集することにより Δx が小さくなり、 Δt だけ前の時刻の位置が隣接する格子よりもさらに離れてしまうと、CUL 法における補間の精度が悪くなるため、移流計算の際には Δt を N 分の 1 にした計算を N 回繰り返す、その後光化学反応による生成・消滅の計算を行うようにした（本報告に示した実験例では、 $N=20$ ）。

さらに、各化学種の体積混合比が局所的に小さくなってしまい、化学反応を通じて他の化学種に伝播することを防ぐため、 10^{-20} より小さい濃度になった場合は 10^{-20} に置き直すようにした。

(4) 実行性能向上のための改良

次に、3次元化学輸送モデルを現実的な速度で実行させるため、並列計算機に対応できるようモデルの改良作業を行った。改良は、`do` ループの見直しと並列計算機での実行を可能とする 2点である。

`do` ループの見直しとして、プログラムのプロファイリングをすることにより、ボトルネックになっているルーチンを抽出し、そのルーチンに対して、ループ処理の順番を入れ替える処理を施した(`setpdj.f`)。

並列計算機への対応では、オリジナルのプログラムをできるだけ活かすため、また活かさないことによる広域的なプログラムの変更に対してのバグの混入を防ぎながらも並列化への対応を可能とするために、並列化の適用は、CUL 法に係わるルーチン `dynam` で定義

された配列に対して行った。

並列化の方法として、複数の CPU がメモリを共有して処理を並行実行させる共有メモリ型並列計算機である HP 社製 DL380 を使用し、OpenMP による並列化チューニングを行った。実行速度の大きな向上と大きな並列度への対応を念頭におくと、分散メモリ型に即した並列化が望ましい。しかし、プログラムの入出力ファイルの制御など、本モデルを利用するユーザへの影響も大きい(例えば、領域分割法で実装された分散メモリ型並列プログラムを実行すると、各領域毎にバラバラのファイルが出力されるのが普通であり、今までの逐次実行型のプログラムからの出力ファイルと同じように計算結果を確認するためには、ユーザになんらかの負担を強いる)。また、既存プログラムのデータ構造を慎重に検討した上で、大域的に変更する必要がある、非常に多くの工数がかかる。これに対して、共有メモリ型並列計算は、多数の CPU による並列計算には向いていないが、分散メモリ型並列計算に比べソースコードの変更が少なく、メモリの配分などの考慮をしなくてもすむし、ユーザも並列化されていることをほとんど意識する必要がない。必要に応じて、加速化したルーチンだけを並列化することも可能である。よって、今回は並列化による加速効果を見極めるための試作品として共有メモリ型を選択した。

(5) 計算時間

本スタディで実施した 1994 年 3 月～1995 年 12 月までの 22 ヶ月間の実験では、改良後のプログラムの計算時間は、次のようになった。

% time	cumulative seconds	self seconds	self calls	routine name
27.92	175876.07	175876.07	21885120	hculs_
13.88	263302.49	87426.43	32184	setpdj_
10.41	328903.25	65600.75	32184	slvhox_
9.94	391531.84	62628.60	32184	setcrk_
8.21	443284.57	51752.72	21885120	vculs_
6.57	484660.39	41375.82	32184	slvnoy_
6.45	525301.83	40641.44	32184	slvox_
6.44	565887.17	40585.34	32184	slvcl_
2.26	580098.20	14211.03	1094256	dynam_
2.03	592859.62	12761.42	21885120	smoo2s_
1.41	601736.18	8876.56	32184	slvbry_

CUL 法の実行に占める割合は約 40 パーセントである。ここで完成した本プロトタイプでは、この部分を計算機の構成に合わせて並列実行することが可能である。

なお、本実験の総計算時間は $629961.35(\text{seconds})=174.99(\text{hours})$ つまり 7.3 日間である。これは、1 日分の計算に要する CPU 時間に直すと約 16 分となり、性能要件を十分に満たす結果となった。

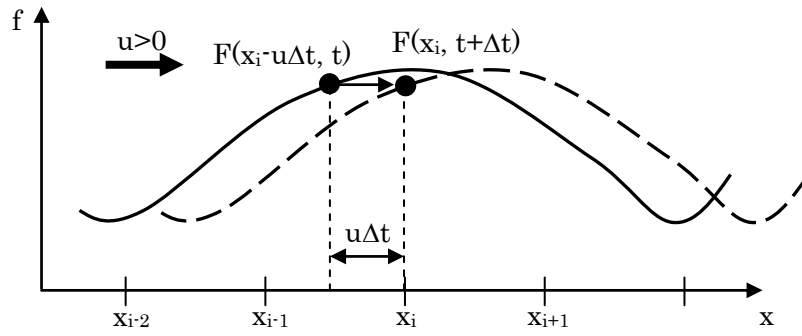


図 3.1.2-1 セミ・ラグランジュ法概念図

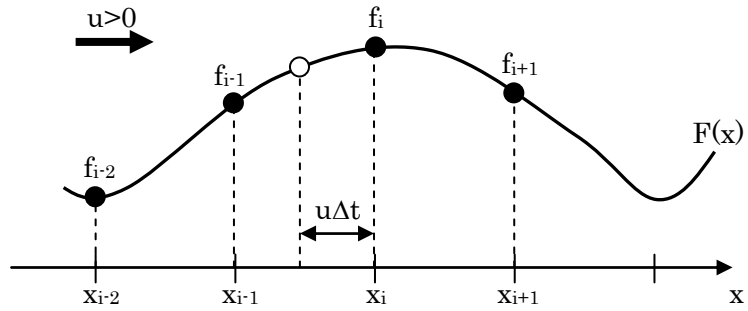


図 3.1.2-2 CUL 法概念図

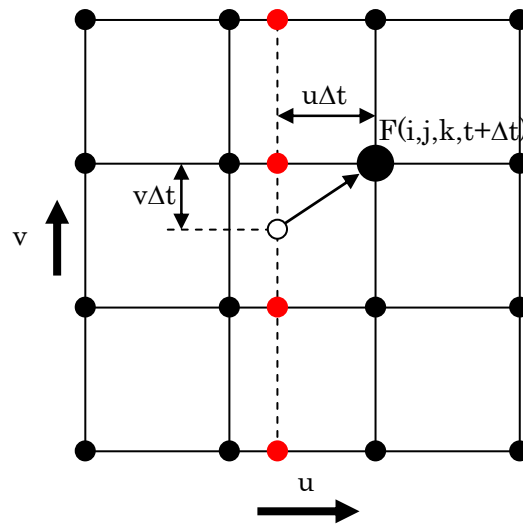


図 3.1.2-3 水平方向補間の概念図

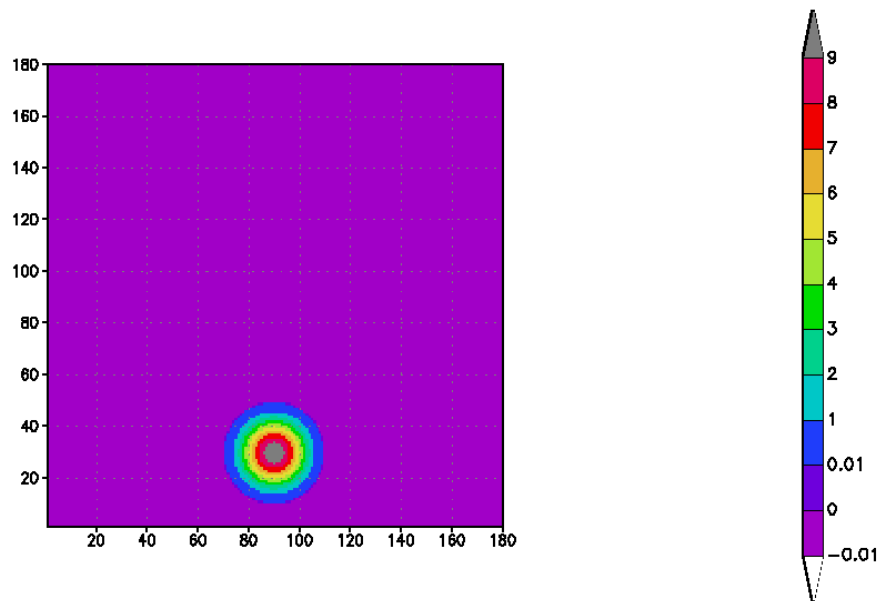
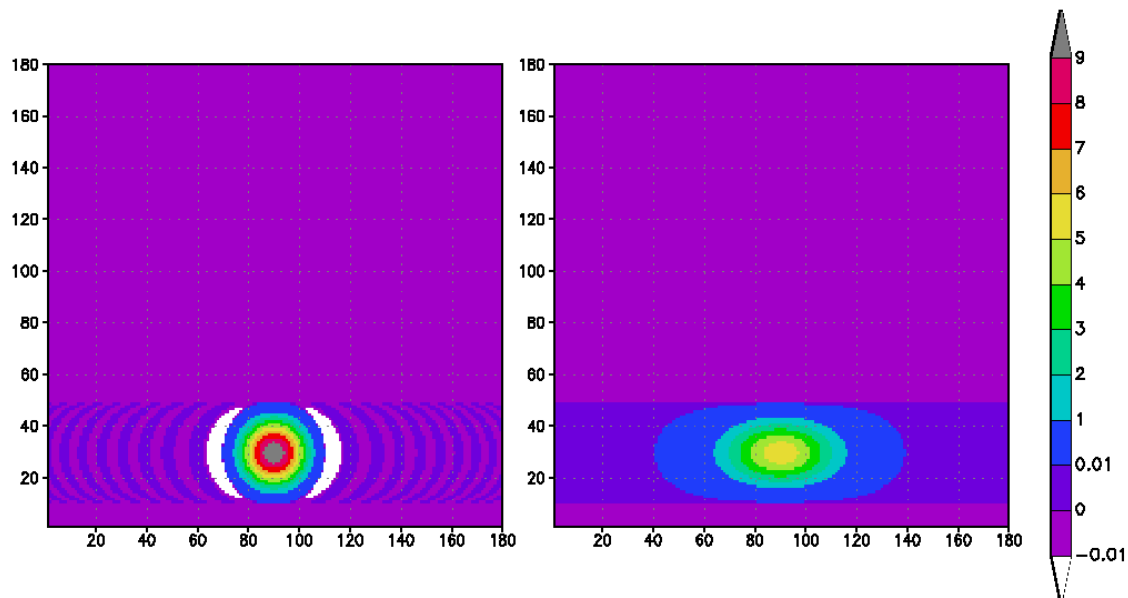


図 3.1.2-4 CUL 法の予備実験 (初期状態)

(a) 計算結果 (左: CUL 法、右: 風上差分法)



(b) 計算結果 (左: CUL 法、右: 数値粘性付き CUL 法)

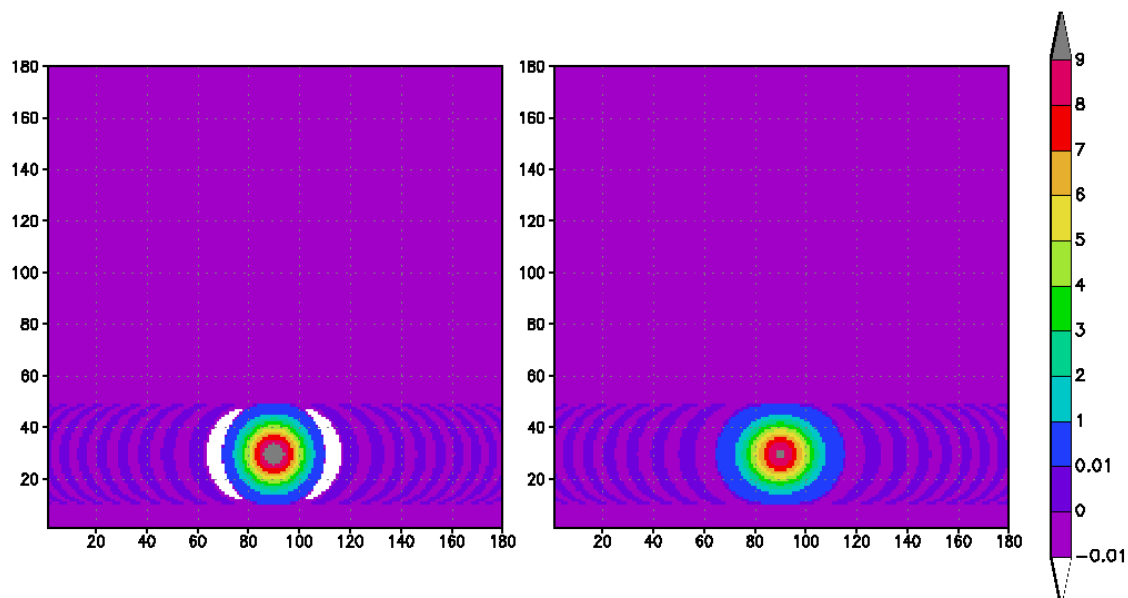


図 3.1.2-5 CUL 法の予備実験の結果

3.1.3 気象データの収集・整理

3次元化学輸送モデルの入力として用いる気象データとして、欧州中期気象予報センター（ECMWF）が解析し発表している全球気象解析データ Basic Level III-A Global Atmospheric Data Archive（以下、ECMWF 全球気象解析データ）を使用した。

ECMWF 全球気象解析データの仕様は、以下のとおりである。

水平解像度：	2.5° 格子（格子数 144×73）
鉛直解像度：	地上+15層（1000, 925, 850, 700, 500, 400, 300, 250, 200, 150, 100, 70, 50, 30, 10hPa）
気象要素：	ジオポテンシャル高度、気温、風速（東西成分、南北成分、鉛直成分）、相対湿度
時間間隔：	12時間ごと（世界標準時 00時、12時）
データ量：	1時刻あたり約 2.1Mbyte
データの期間：	1994年1月1日～1994年12月31日

ECMWF 全球気象解析データ及びそのソフトウェアの利用にあたっては、以下の利用条件がある。

1. 本ソフトウェアの所有権及び著作権は ECMWF が保有する。本ソフトウェアは ECMWF データの利用目的に限り提供されるものであり、他の目的のために利用してはならない。
2. ECMWF の許可なく、提供されたデータならびにソフトウェアの全部あるいは一部を、第三者に提供してはならない。
3. データおよびソフトウェアを商用目的で利用してはならない。
4. ECMWF の提供したデータの全部あるいは一部に基づいた記事、論文、ならびに科学研究の成果を公表する場合は、ECMWF 提供データである旨を次の例のように明示しなければならない：“ECMWF 1996. The Description of the ECMWF/WCRP Level III-A Global Atmospheric Data Archive”
5. データならびにソフトウェアの準備およびテストには万全を期しているが、どのような状況の下でもデータが正しいこと、あるいはどのような状況でもソフトウェアが正しく動作することを ECMWF が保証するものではない。本データおよびソフトウェアの誤りないし欠損、ならびにその利用に基づくいかなる損害や損失に関しても、ECMWF はその責を負わない。
6. 本データおよびソフトウェアの利用は、データの提供を受けた組織の科学者が同一のコンピュータにインストールする場合に限る。
7. 本データおよびソフトウェアの提供を受けたものは、すべてのデータ利用者に対し、

この利用条件を知らせる責任がある。

データは 18トラックの IBM3480 カートリッジテープにラベルなし (NL)、ブロック長 10560 バイトで記録されている。但し、レコード長を示すワード等は含まれていないので、直接 (Direct) アクセスで読み込んだ。1つの論理レコード (21108 バイト) は 2つのテープブロックから構成されている。

オリジナルのデータファイルでは 1ヶ月分のデータを 1ファイルに収容していたが、そのままでは扱いにくいので 1時刻 1ファイルに分割した (フォーマットは変更していない)。

1時刻分のファイルは 99のレコード (2,089,692 バイト) からなり、1つのレコードには、1つの気圧面、1つの気象要素のデータが全球分格納されている。

1つの論理レコード (21108 バイト) は、WMO が世界の気象機関間のデータ交換のために定めた書式 FM-92 GRIB (GRIdded Binary) に従って構成されている。GRIB は各種のデータを表現することができるようさまざまなパラメータが指定できるようになっている。ECMWF 気象解析データの場合、次の 5つのセクションから構成されている (セクション 3 (ビットマップセクション) は存在しない)。

- セクション 0 (8 バイト) : 表示セクション
- セクション 1 (28 バイト) : 製品定義セクション
- セクション 2 (32 バイト) : 格子記述セクション
- セクション 4 (21036 バイト) : バイナリデータセクション
- セクション 5 (4 バイト) : 終端セクション

ECMWF 全球気象解析データは圧縮されて保存されているので、読み出す際には復元する必要がある。そのためには、セクション 1 の 10進スケール値 D、セクション 4 の 2進スケール値 E、基準値 R、及び各格子点の値 $X(i,j)$ ($1 \leq i \leq 144$, $1 \leq j \leq 73$) を用いると、元のデータ $Q(i,j)$ は、

$$Q(i,j) = (R + X(i,j) \times 2^E) \times 10^{-D} \quad (3.1.3-1)$$

によって得ることができる。なお、基準値 R は IBM 浮動小数点表現となっているため、プログラム内で変換する必要がある。

以上のデータの読み出し・変換等については、ECMWF から送付されてきたテープに FORTRAN (一部は C) のプログラム GRIBEX が付属していたので、これを利用した。

ECMWF 気象解析データのグリッドは、第 1 添字が経度 (東向き)、第 2 添字が緯度 (南向き) を表わす。データ点は (1,1) から順に東回りに並び、(144,1) は (1,1) の西隣となっており、2 列目はその南隣の列になる。また 1 列目のデータはすべて北極点の値、73 列目のデータはすべて南極点の値である (スカラー値は同じ値が入っている。ベクトル値については各子午線を基準軸に取った値に変換されている)。

3.1.4 モデルの検証

1999年にNASAが実施した「モデルと観測ワークショップⅡ」(Models and Measurements Workshop II、以下M&MワークショップⅡ)の報告書¹⁾と同等の条件で計算を行い、計算結果をNASAの同報告書にまとめられている観測値や他のモデルの計算値と比較し、どの程度一致するかを検証した。

計算条件は以下のとおり。

計算期間：1994年3月1日0時～1995年12月31日0時(世界標準時)

初期条件：東西方向に一様

本プロトタイプでは高度領域が10hPa面(約32km)までしかないため、オゾン体積混合比の子午面分布(高度30kmか少し上くらいにピークがある)やオゾン全量(鉛直積分量)で比較することはできない。

そこで、オゾン分圧の子午面分布および高度分布が再現できているかどうかを検証した。季節ごとのオゾン分圧の子午面分布を図3.1.4-1に示す。対流圏の赤道域にオゾン分圧が15nb以下となる少ない領域があること、オゾン分圧のピーク高度が、極域では100hPa面付近であるのに対し、低緯度領域では30～20hPa面付近であることなど、分圧値も含めてよく再現できている。

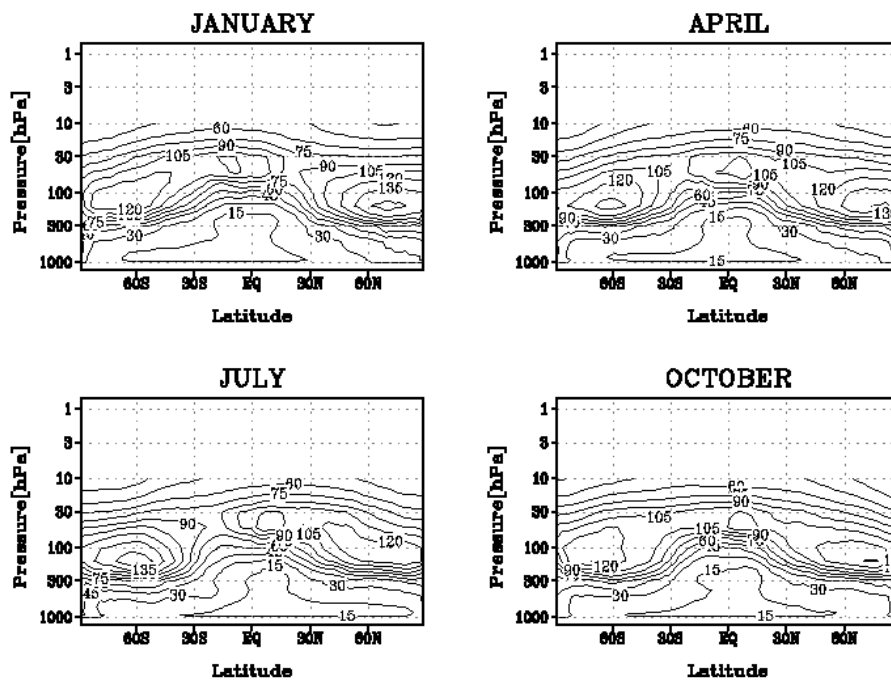
オゾン分圧の高度分布を図3.1.4-2～図3.1.4-6に示す。下部成層圏のオゾン分圧の最大値や、それ以上の高度でのオゾン分圧の値は、気候値と比べ若干低めであるがよく一致している。しかし、対流圏のオゾン分圧は過小評価となり、下端境界値(30ppbv)よりも少なくなってしまう。但し対流圏のオゾン濃度は他のモデルもばらつきが大きく、本プロトタイプの結果はその範囲内に入っているといえる。

オゾン以外の化学種について観測値との比較を行ったものが図3.1.4-7～図3.1.4-8(順にN₂O、CH₄)である。図3.1.4-7のN₂O体積混合比の子午面分布では、値は概ね合っているものの、低緯度における高濃度の再現性が十分でない。CH₄体積混合比の子午面分布についても同じことがいえる(図3.1.4-8参照)。これは赤道域で活発な積雲対流による上方への輸送が、本プロトタイプでは表現されていないことが原因と考えられる(表1.1-1参照)。

一方、他のモデルによる計算結果と比較したものを図3.1.4-9に示す。HNO₃の体積混合比の子午面分布(図3.1.4-9参照)では、25km付近の濃度ピークがあることは再現できているが、その値は他のモデルに比べて小さ過ぎ、対流圏の濃度は逆に過大に評価されている。本プロトタイプでは、湿性沈着(雲水や雨水に溶けて大気中から除去されること)のプロセスが導入されていないため、対流圏におけるHNO₃の濃度が過大評価されたものと考えられる。

(a) 本モデル計算値

OZONE Number Density[nb]



(b) 気候値

B1. OZONE CLIMATOLOGY (nb)

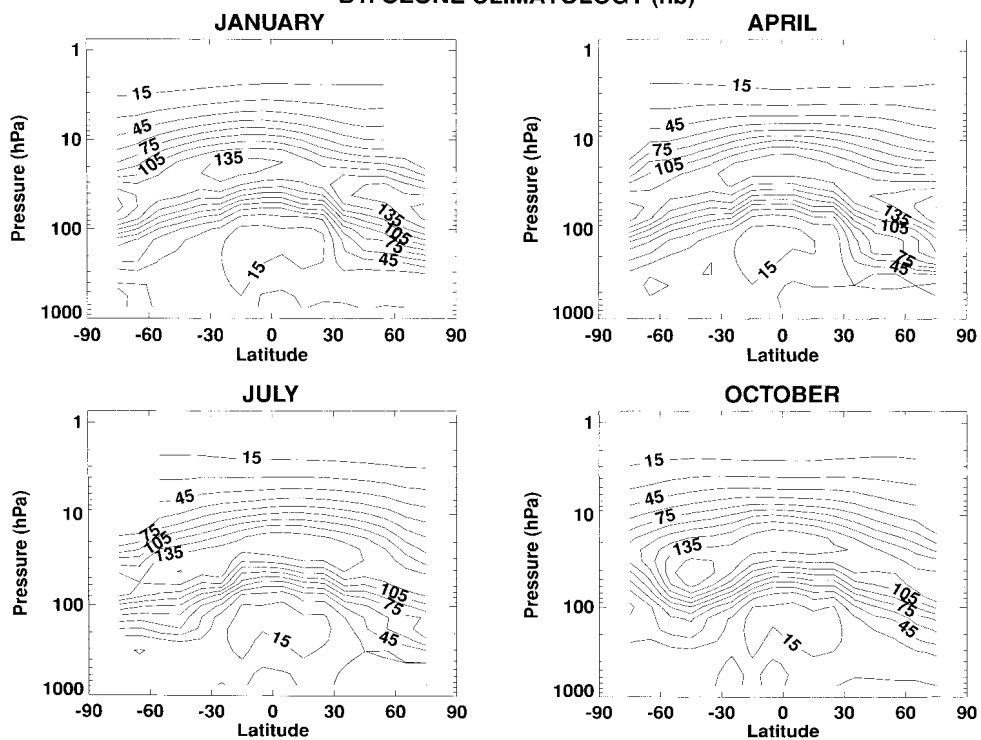
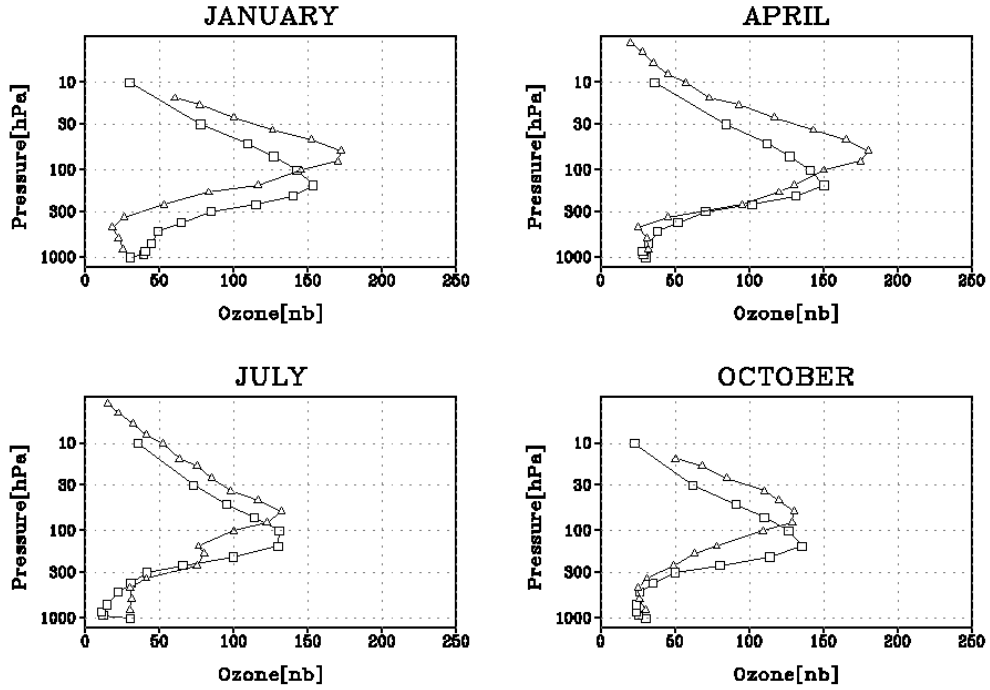


図 3.1.4-1 各季節のオゾン分圧の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 70-80N

□ 本モデル
△ 気候値



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 70-80N

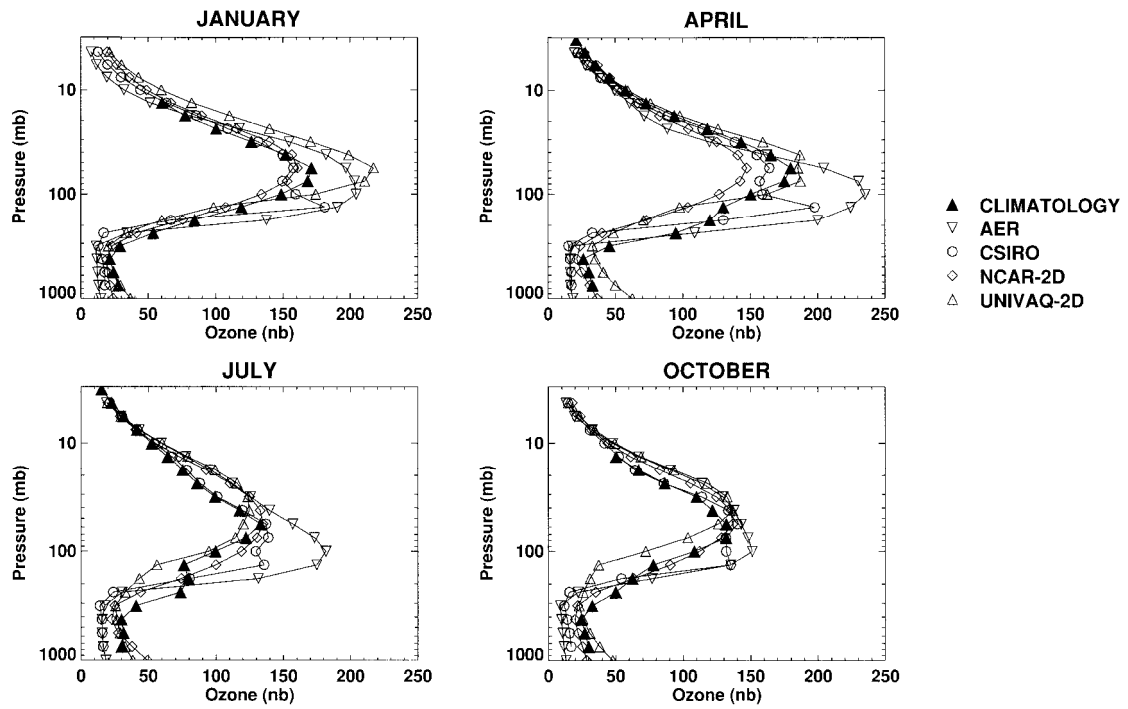
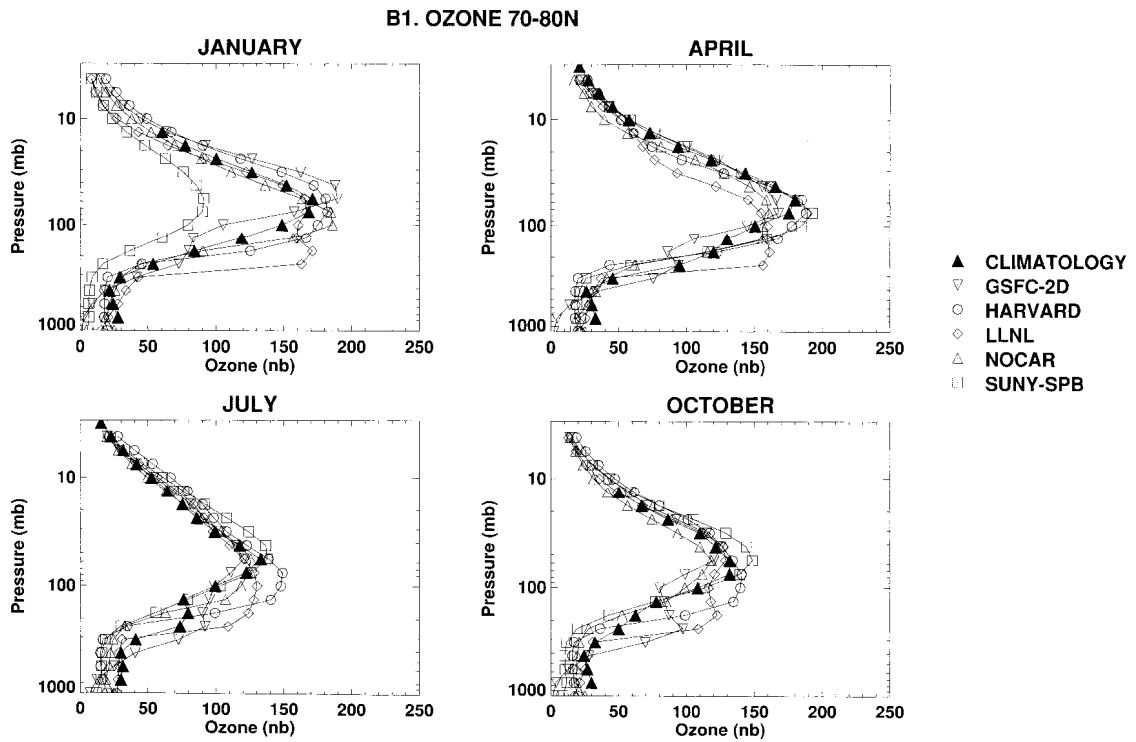


図 3.1.4-2 北半球高緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

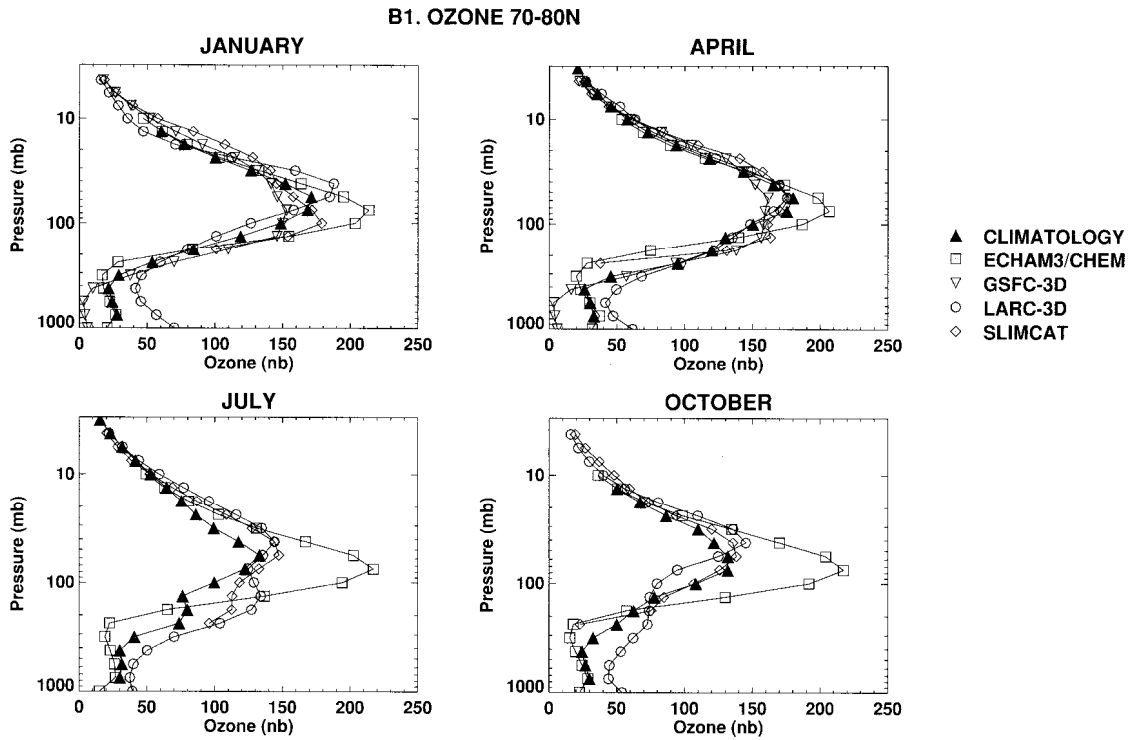
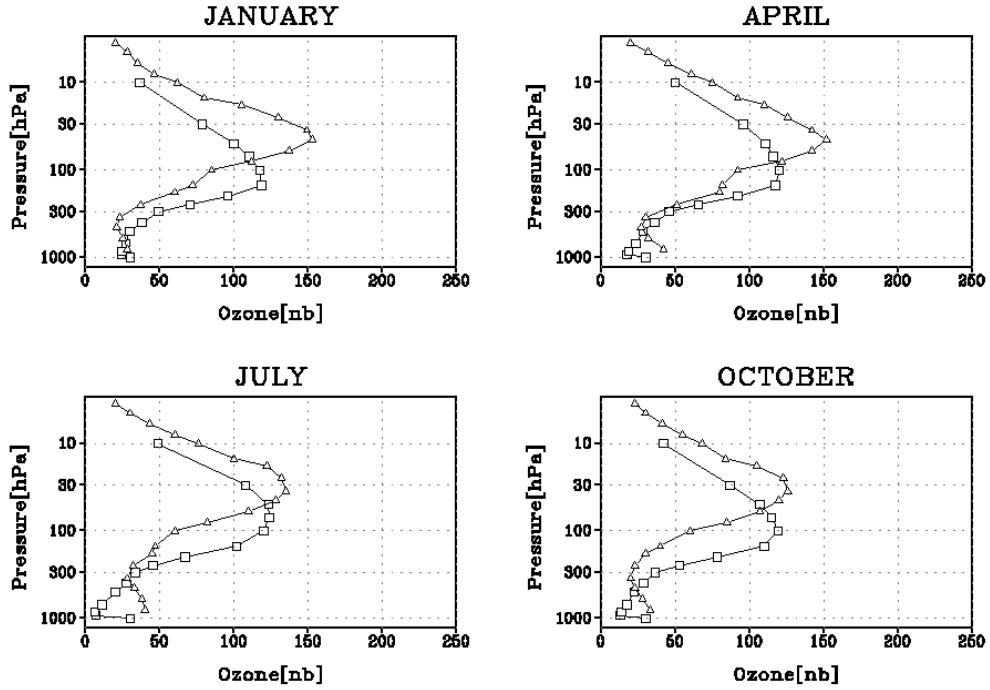
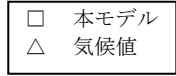


図 3.1.4-2 北半球高緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 40-50N



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 40-50N

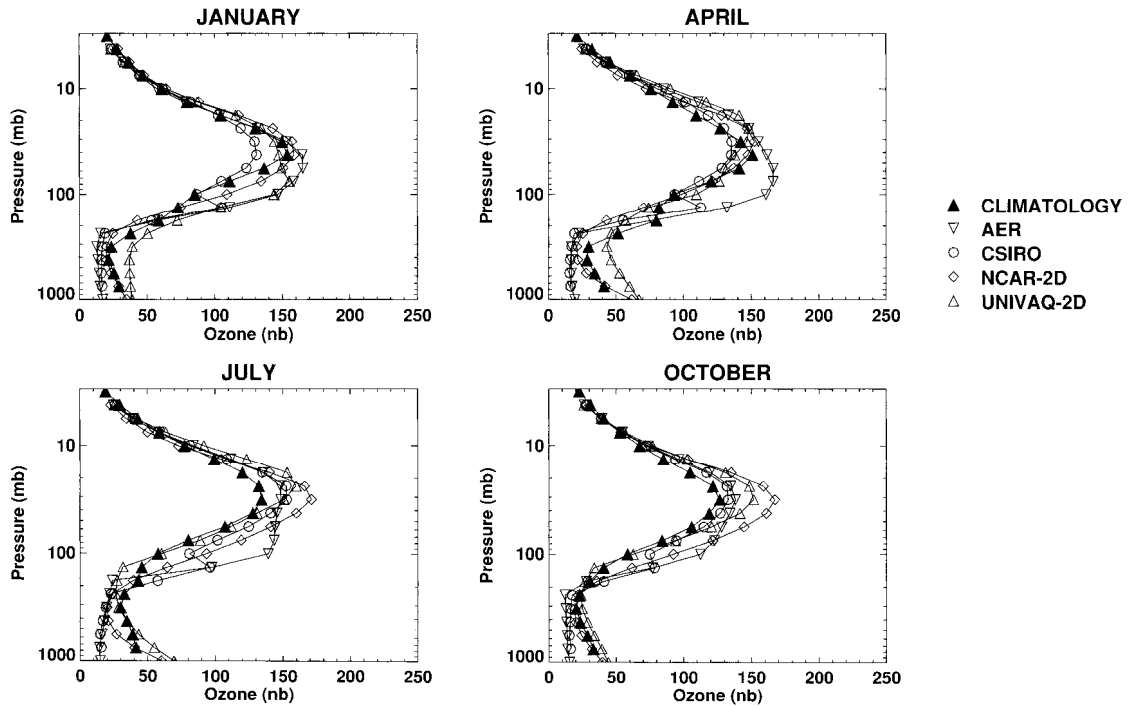
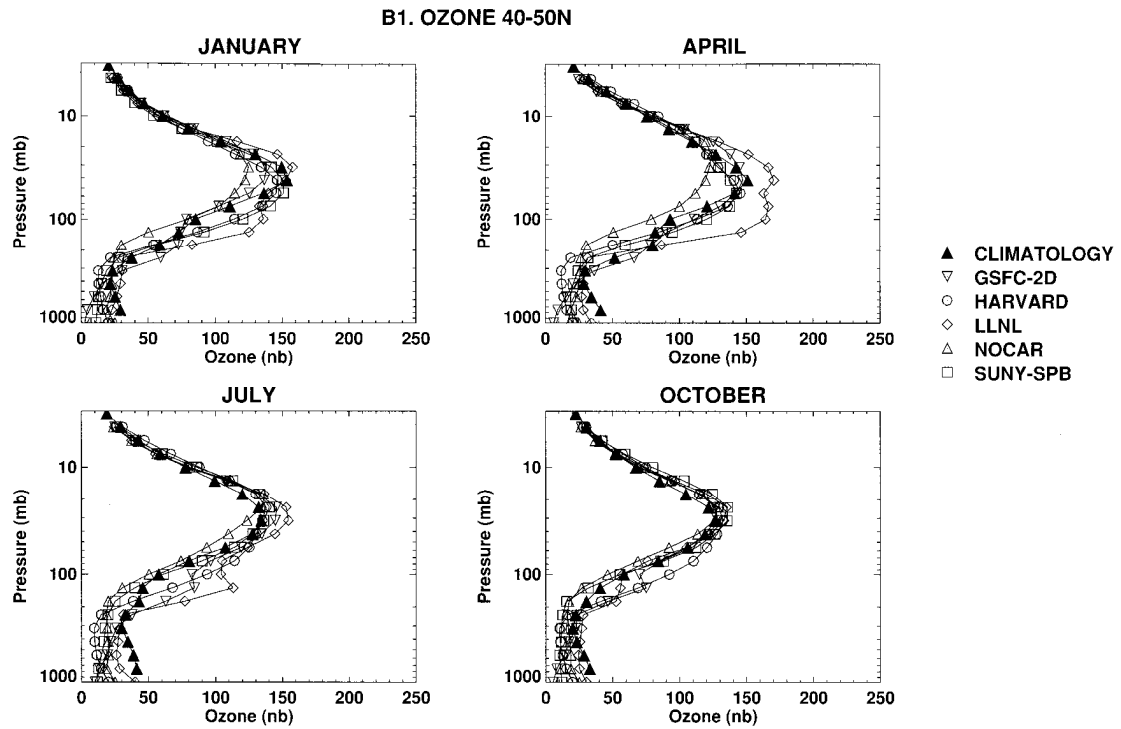


図 3.1.4-3 北半球中緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

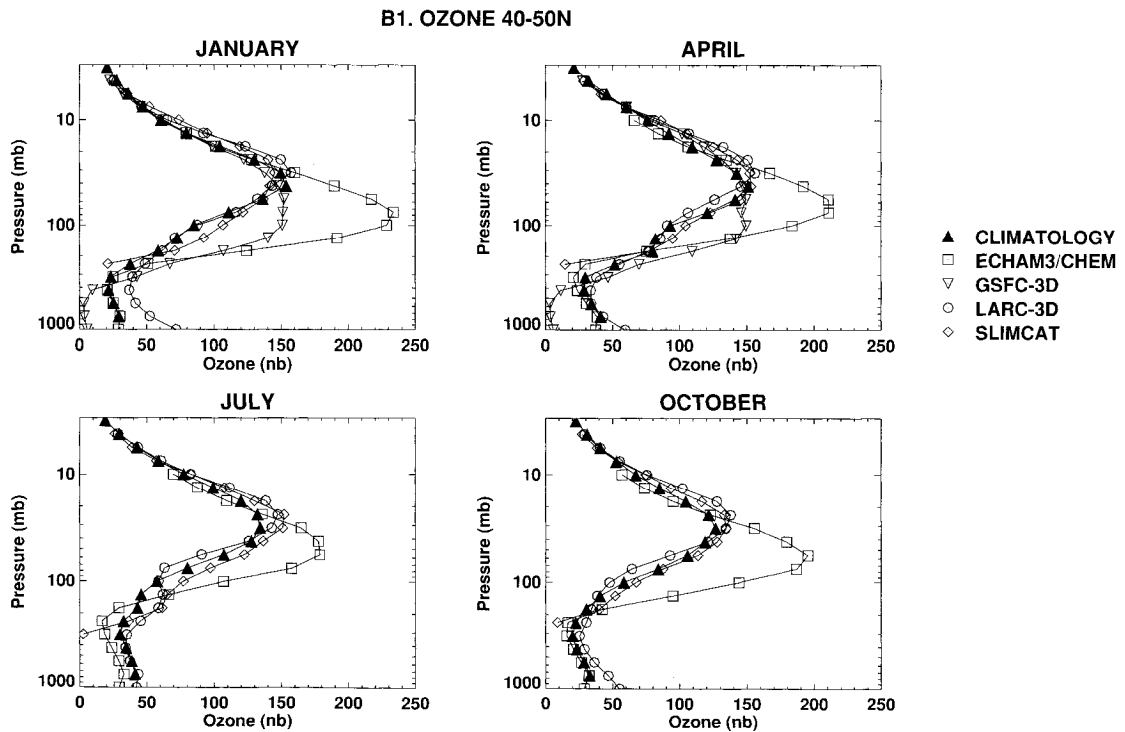
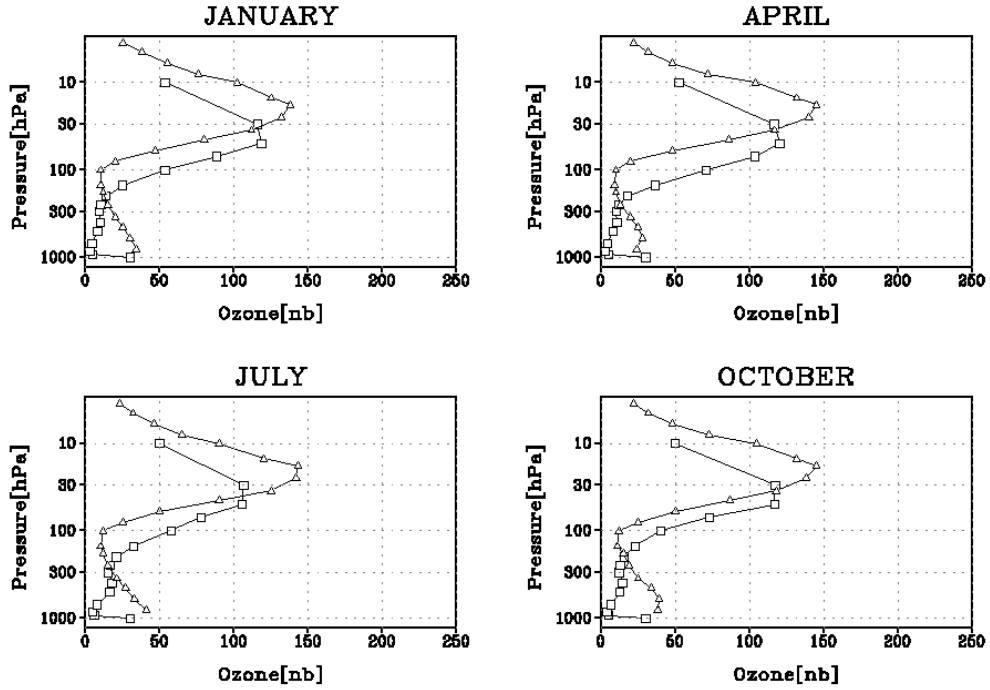
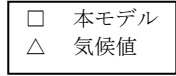


図 3.1.4-3 北半球中緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 10S-0



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 10S-0

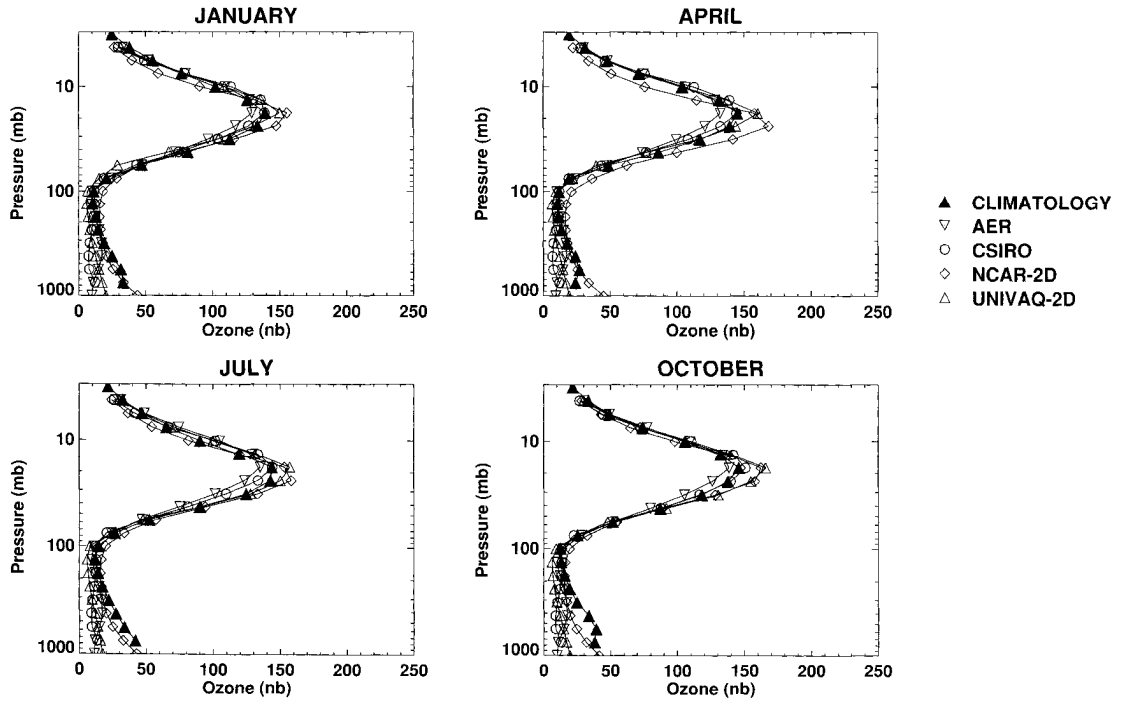
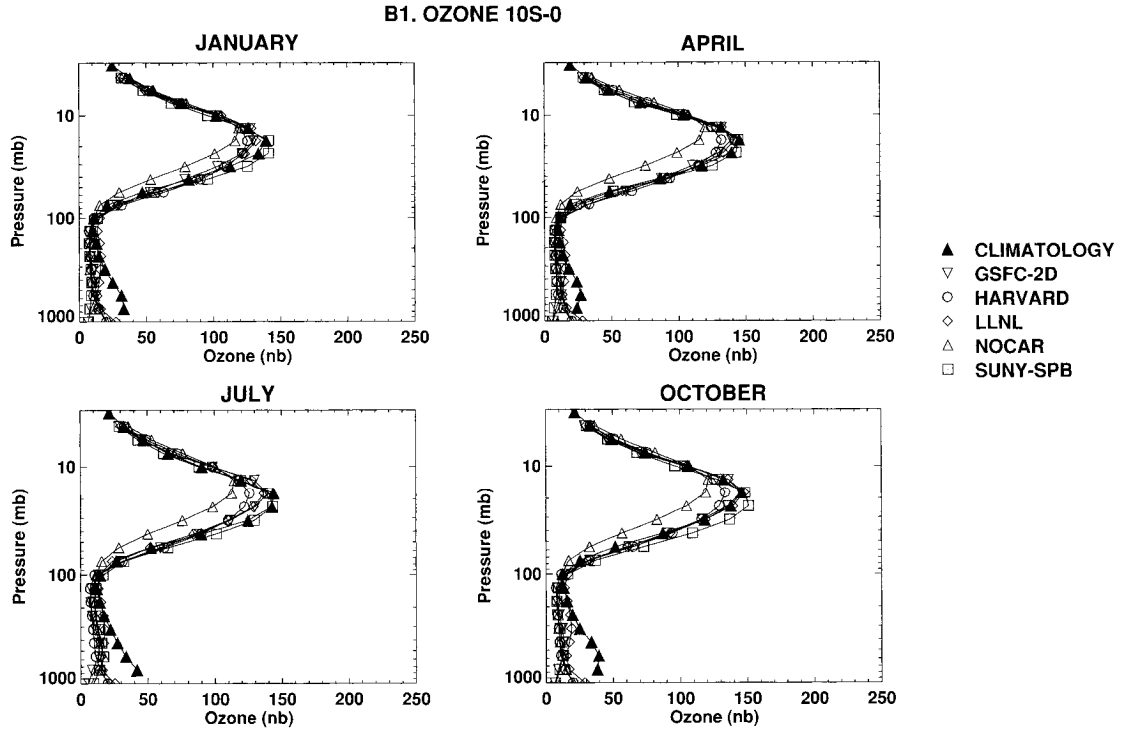


図 3.1.4-4 赤道域におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

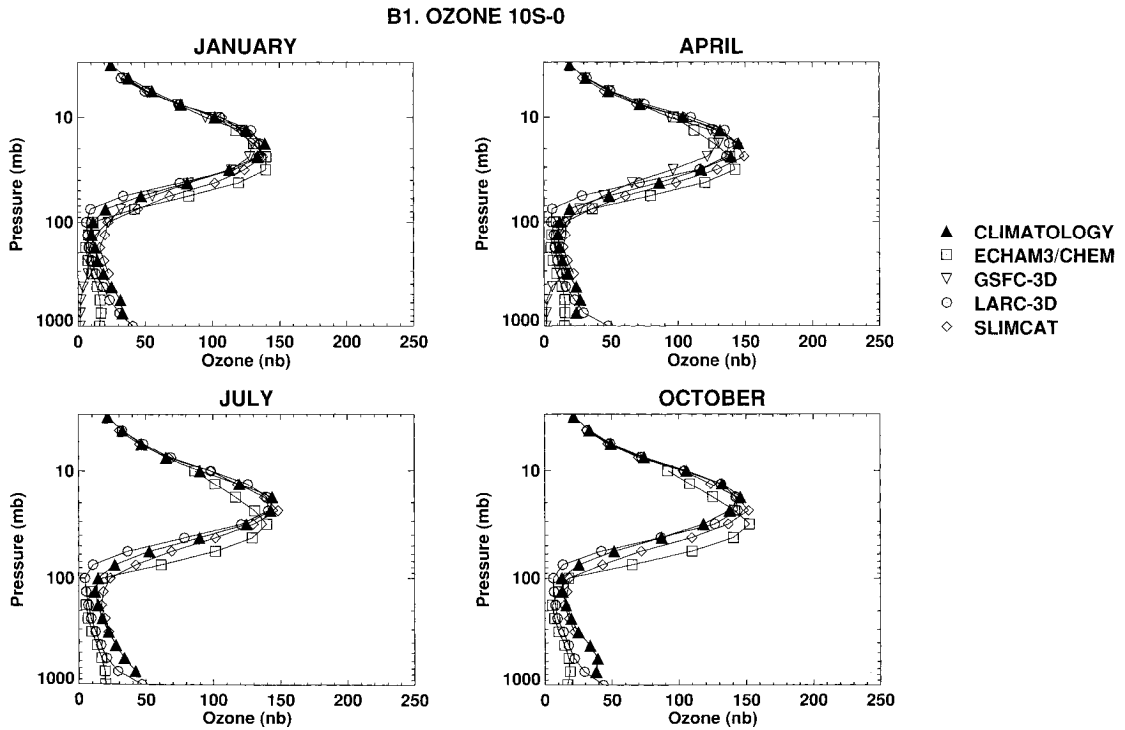
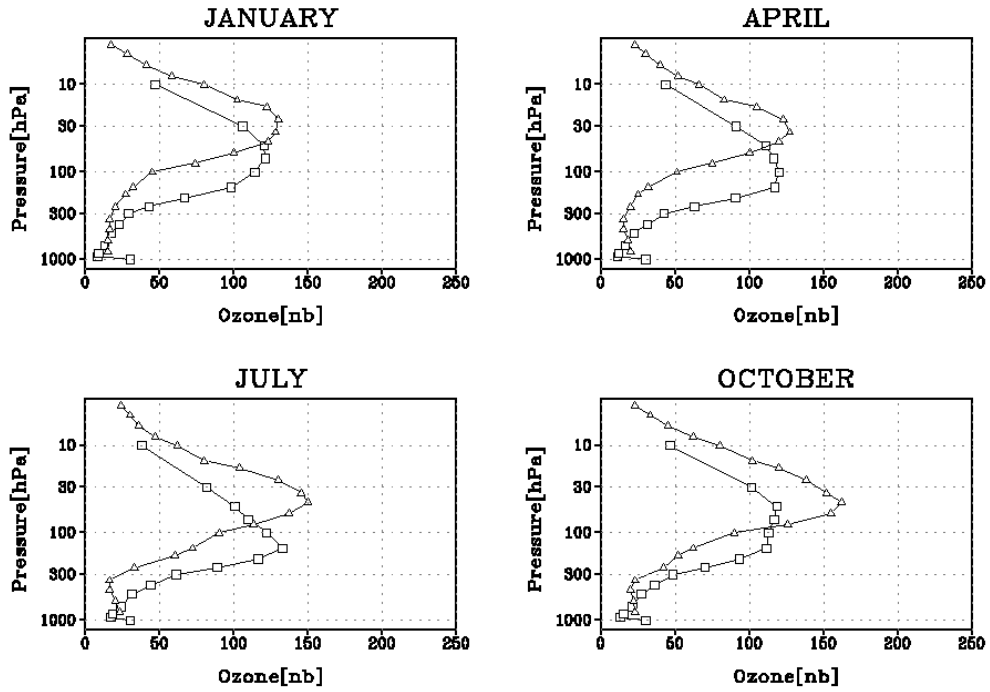
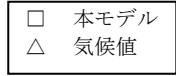


図 3.1.4-4 赤道域におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 50-40S



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 40-50S

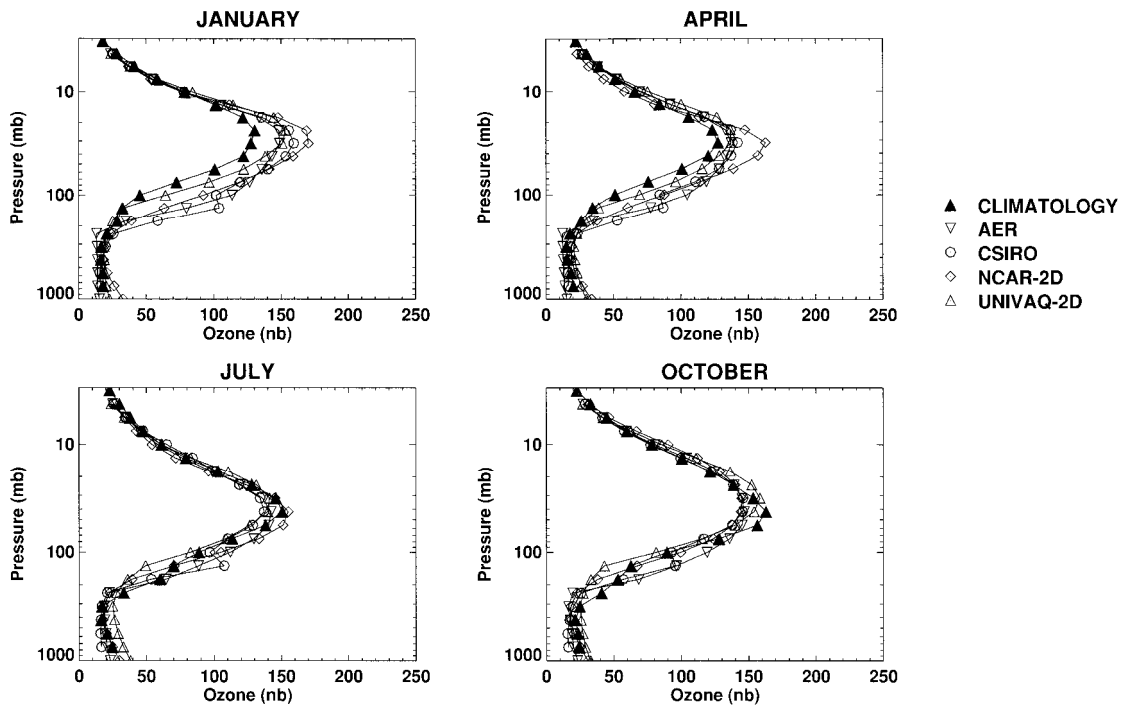
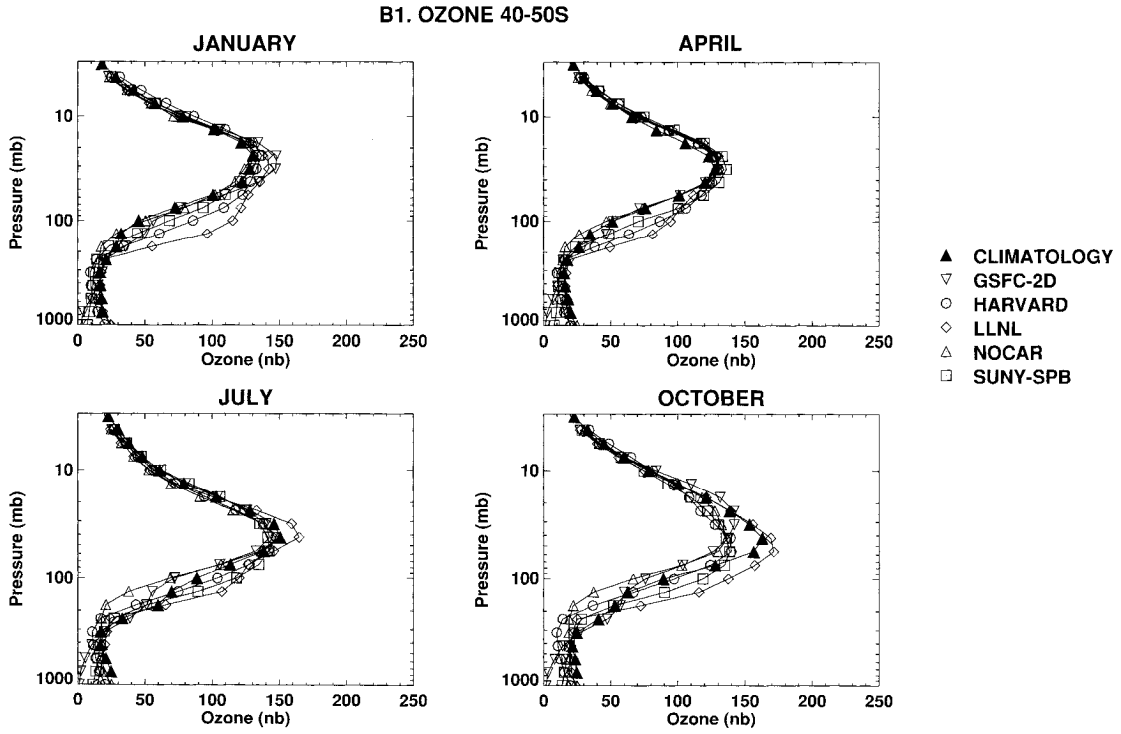


図 3.1.4-5 南半球中緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

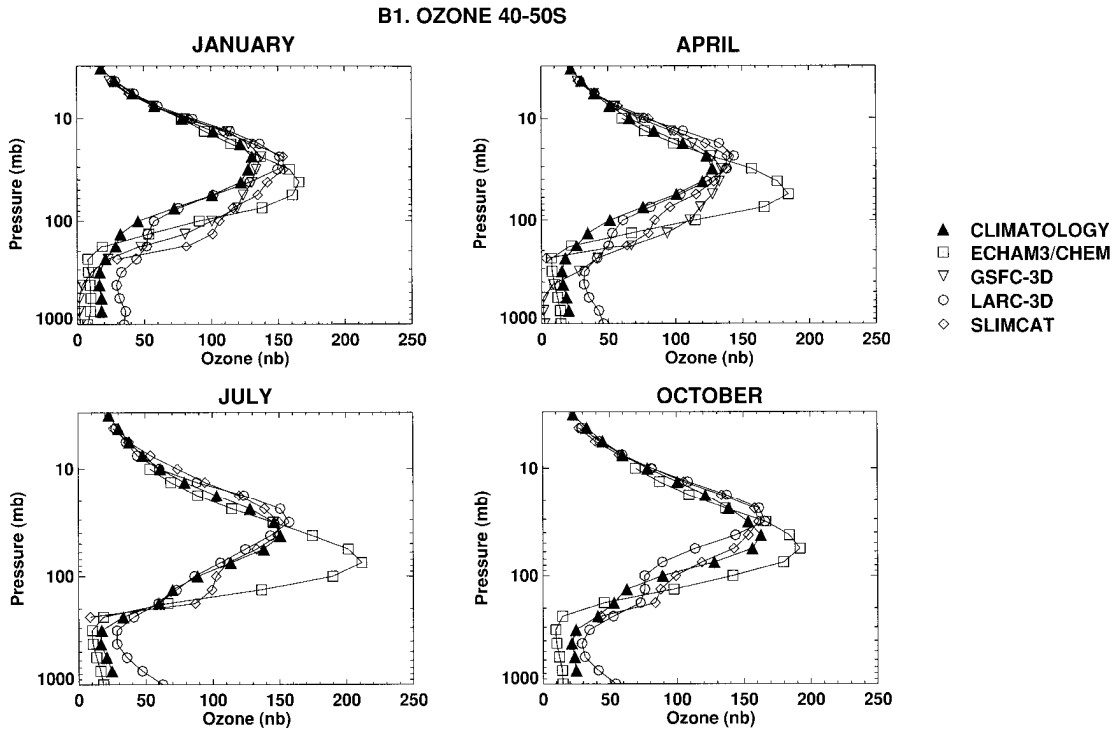
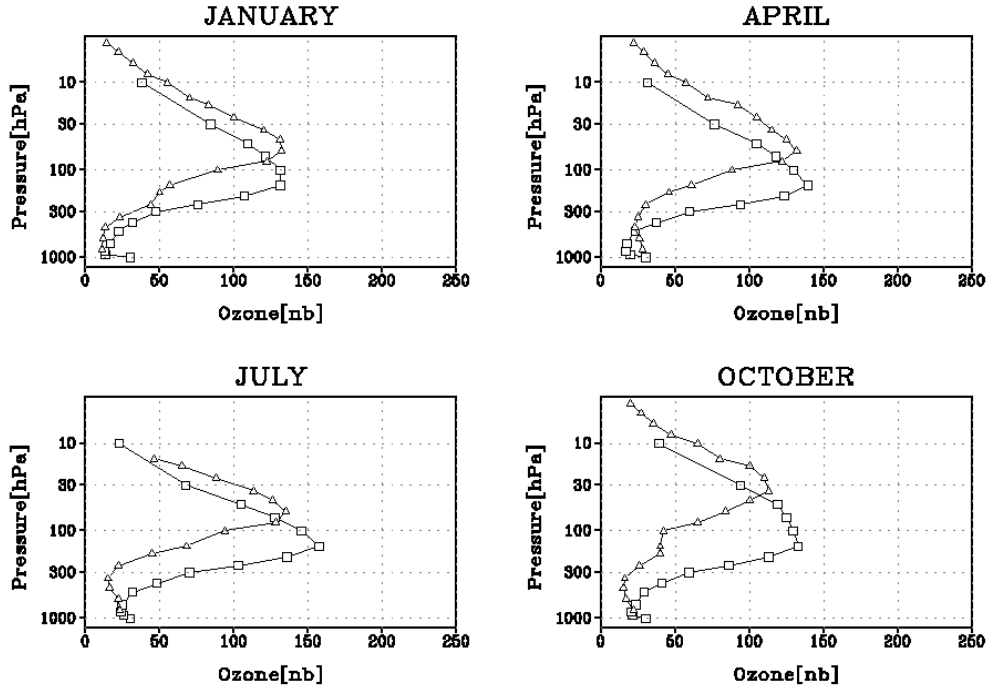
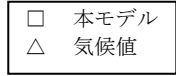


図 3.1.4-5 南半球中緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

OZONE[nb], 70-60S



(b) 気候値および他のモデル計算値(1)

B1. OZONE 60-70S

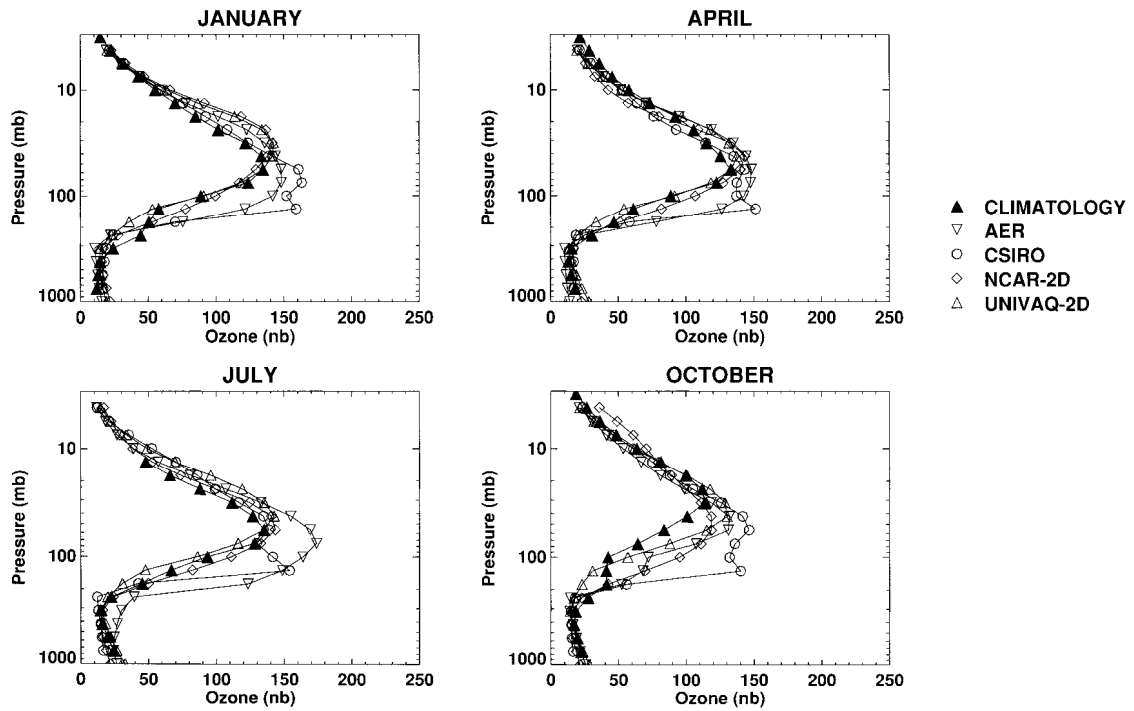
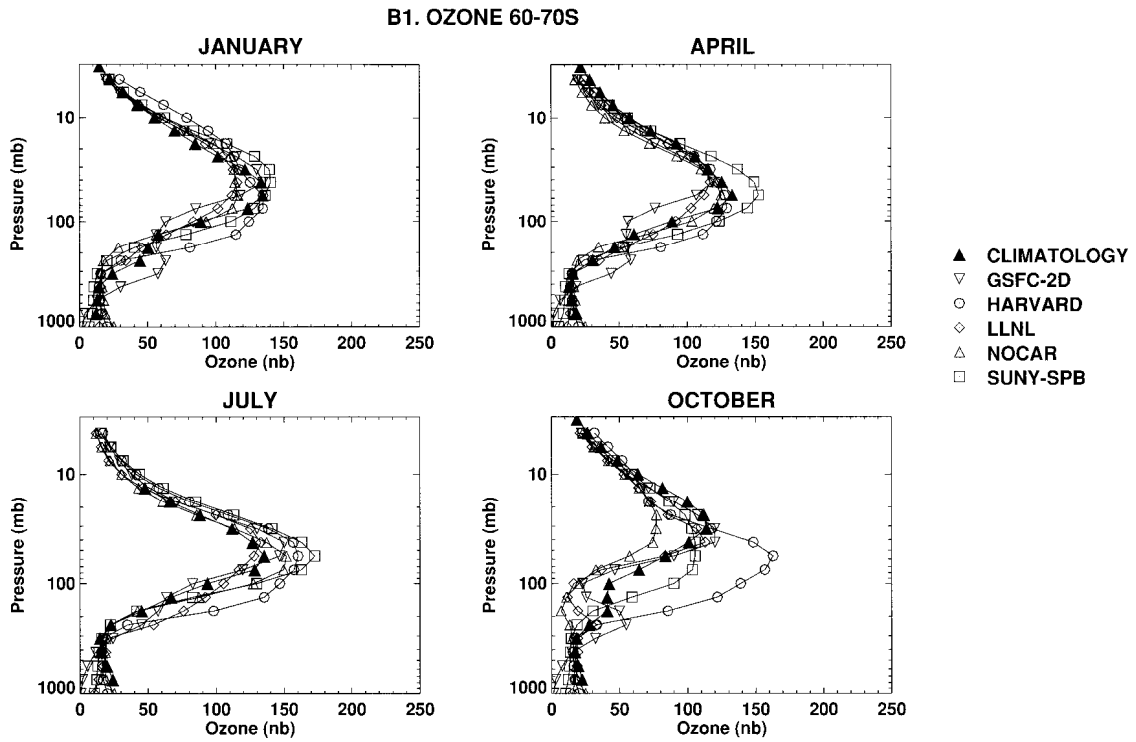


図 3.1.4-6 南半球高緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較

(c) 気候値および他のモデル計算値(2)



(d) 気候値および他のモデル計算値(3)

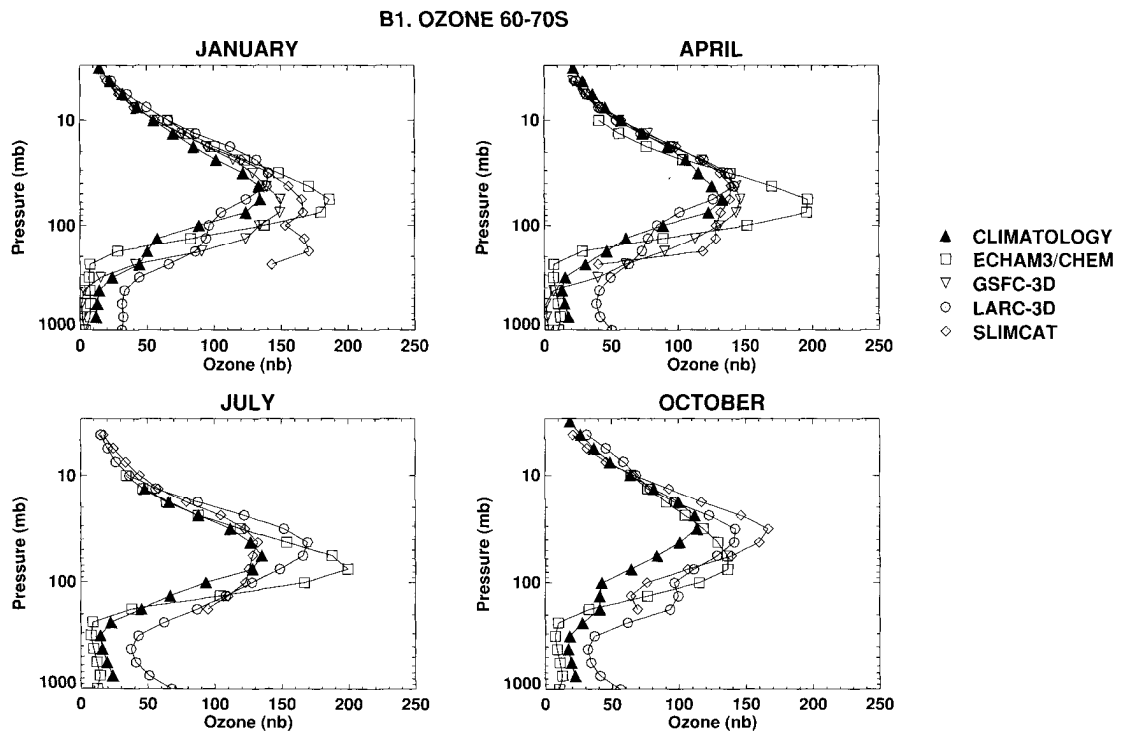
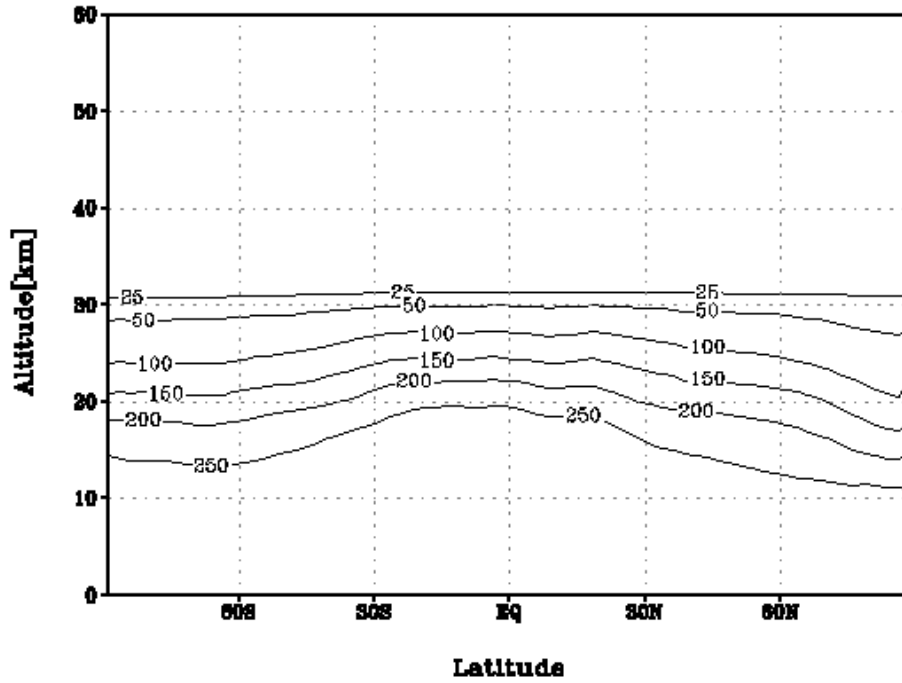


図 3.1.4-6 南半球高緯度におけるオゾン分圧の高度分布の比較 (続き)

(a) 本モデル計算値

N₂O[ppbv], March 1994



(b) 人工衛星観測値

CLAES N₂O MAR - APR 1992

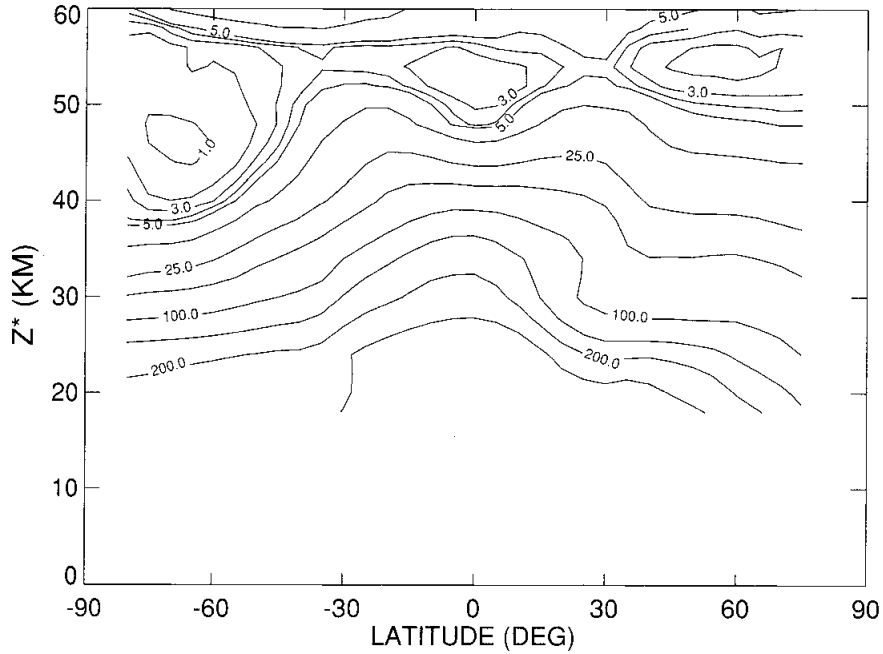
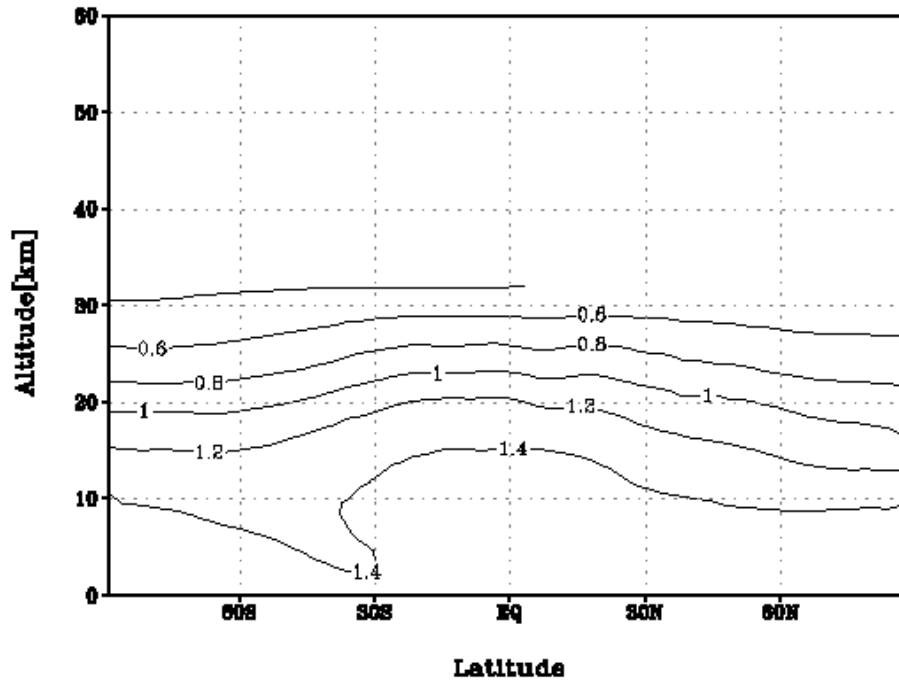


図 3.1.4-7 N₂O 体積混合比の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

CH₄[ppmv], April 1994



(b) 人工衛星観測値

HALOE CH₄ March→April 1992

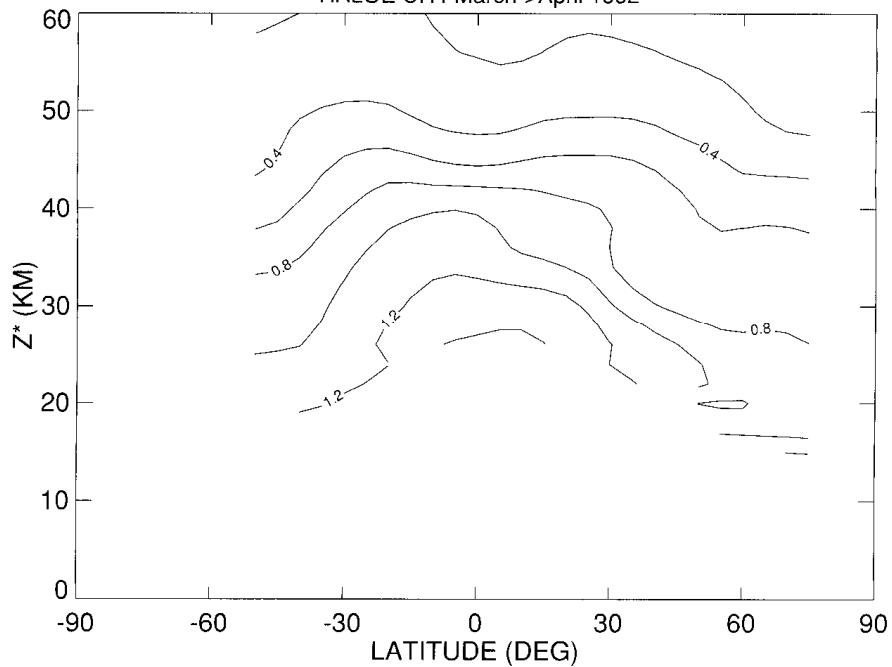


図 3.1.4-8 CH₄体積混合比の子午面分布の比較

(a) 本モデル計算値

HNO₃[ppbv], June 1994

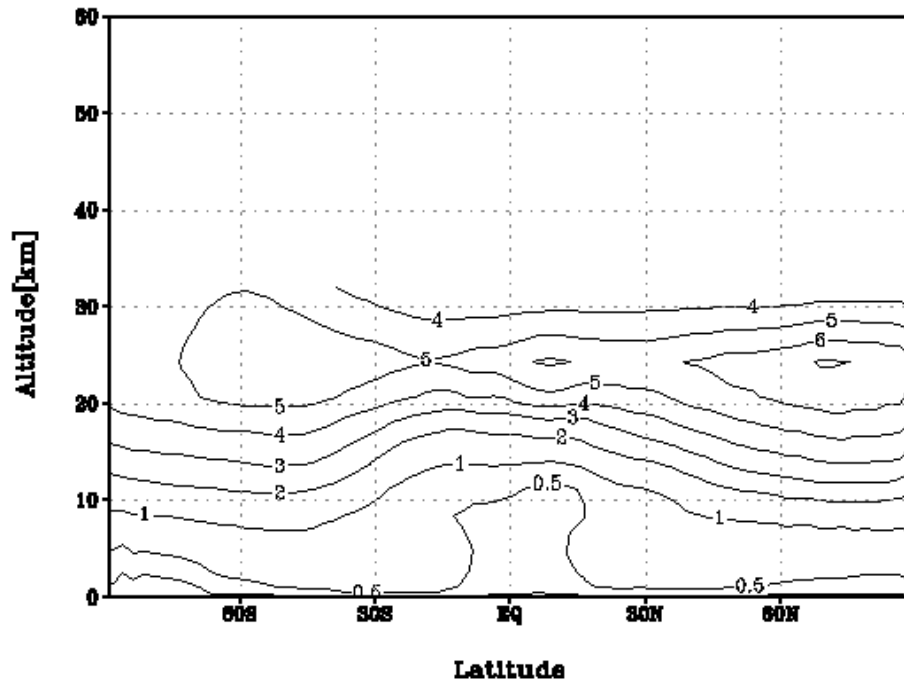


図 3.1.4-9 6月の HNO₃体積混合比の子午面分布の比較

(b) 他のモデル計算値(1)

B1. HNO₃ JUNE

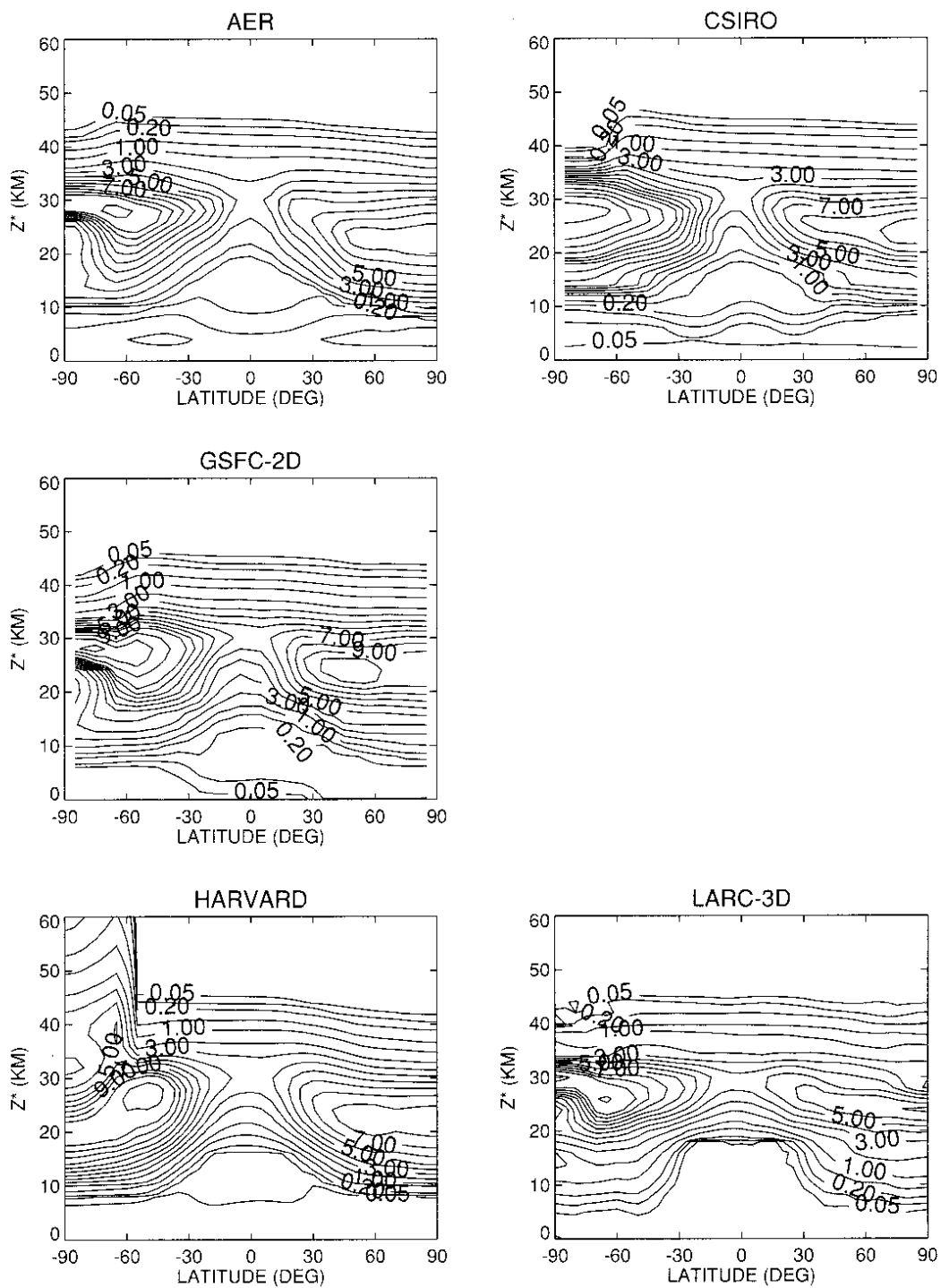


図 3.1.4-9 6月の HNO₃ 体積混合比の子午面分布の比較 (続き)

(c) 他のモデル計算値(2)

B1. HNO₃ JUNE

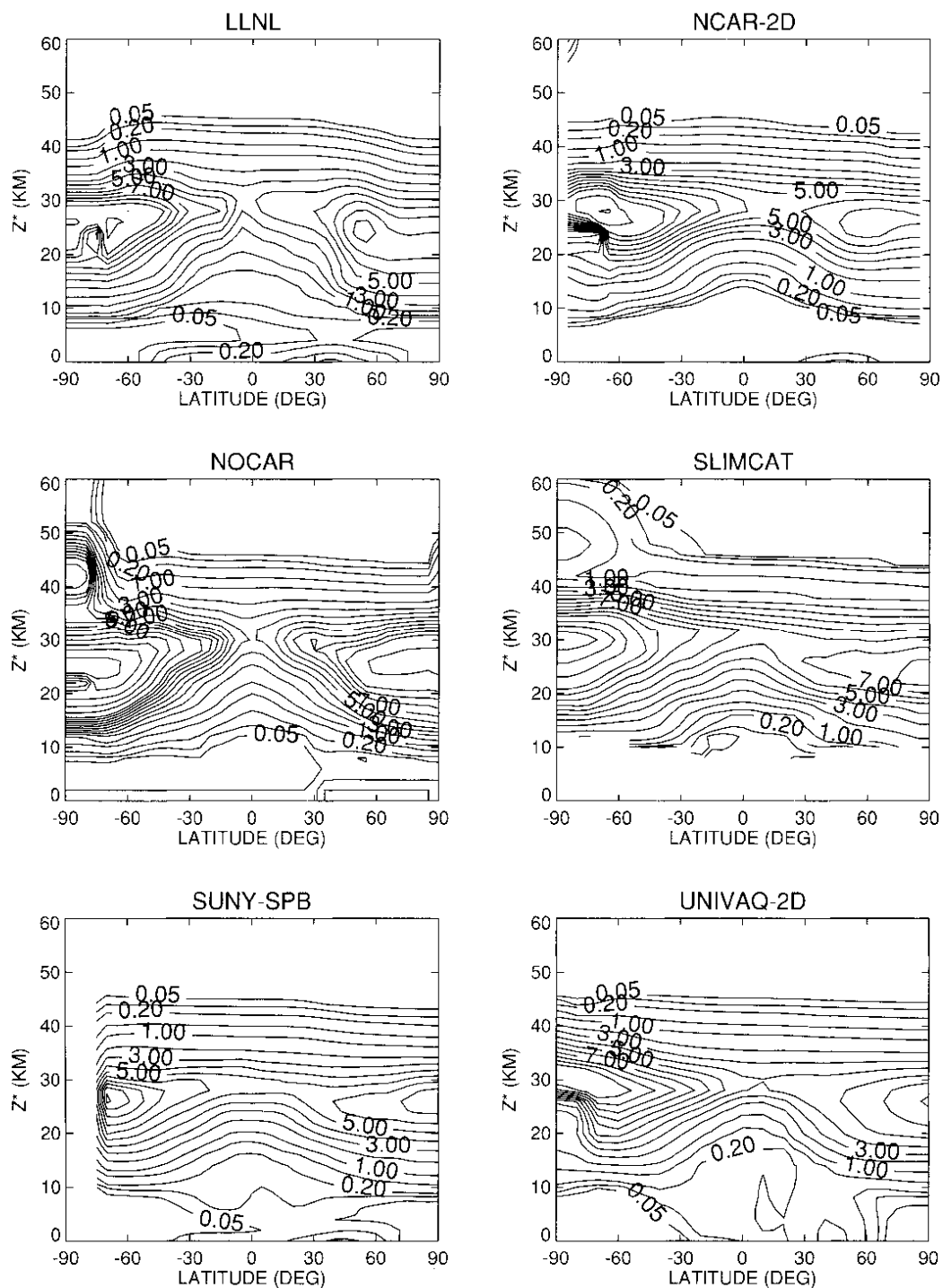


図 3.1.4-9 6月のHNO₃体積混合比の子午面分布の比較(続き)

3.1.5 海外調査の成果

(1) 調査目的

本スタディの一環として、米国国立大気研究センター等の研究機関を訪問し、化学輸送モデルの研究者と意見交換を行うことにより、高層大気研究に関する最新の国際動向や最先端技術の情報を収集する。

(2) 訪問先

米国国立大気研究センター

NCAR (National Center for Atmospheric Research) G. Brasseur 教授

NASA ラングレー研究センター

LaRC (Langley Research Center) M. Ko 博士

(3) 調査結果

1) Brasseur 教授との面談結果

- ①化学輸送モデル MOZART は、バージョン 2 からバージョン 3 およびバージョン 4 になった。これらは 2→3→4 と連続したバージョンではなく、特色の異なる別個のモデルである。
- ②このほか、NCAR の気候モデル CCSM (Community Climate System Model) に MOZART の化学モデルを組み込んで、気温や風などと化学物質の濃度を同時に計算させるオンライン・モデルの開発も行なっている (これに対して化学輸送モデル単体で、気象データを外部から与えるものをオフライン・モデルと呼んでいた)。
- ③航空機の気候影響に関する研究は継続している。
- ④移流過程については、Lin and Rood のスキームがフラックス形式で定式化されており保存性もよい。また、気象解析データを用いる場合、鉛直風は誤差が大きく連続の式が成り立たないので、水平風速を元に連続の式を満たすような鉛直風速を求めた方がよい。
- ⑤化学輸送モデルの使い道としては、
 - 航空機のフィールド観測時の飛行プラン立案
 - 化学種の収支の研究
 - 化学物質の予報 (エアロソルや温室効果気体等) →局地的な予報の初期条件や境界条件として用いる
 - 100 年前から 100 年先までの大気状態の再現・予測
 - 船舶のエンジン排気の影響予測 (NO_x、CO、煤)
 - ハロゲン (臭素 Br、ヨウ素 I の化合物)

等があると考えている。

2) M. Ko 博士との面談結果

①ACCRI (Aviation Climate Change Research Initiative) は、NextGen (Next Generation Air Transport System) の一環として JPDO (Joint Planning and Development Office) と FAA が立ち上げた研究計画。NextGen は 2025 年までに航空需要が 3 倍になるという予測のもとに、空港や航空管制などのシステムをどのようにすればよいかを研究するもの。

②その一部として航空機の気候影響を研究する ACCRI があり、

- 上部対流圏・下部成層圏の化学と輸送
- 飛行機雲と巻雲：生成・微物理・ライフサイクル
- 飛行機雲と巻雲：光学特性と放射
- 気候への影響の分野について

科学的理解の現状と不確実性及びモデリング・解析の能力の現状を白書にまとめる。

③航空機の気候への影響については、現在のところ二酸化炭素の影響は 5%程度であるが、NO_x によるオゾン生成の影響が同程度あり、飛行機雲・巻雲の影響はよくわかっていない。さらに、上記のように航空機の需要増大が見込まれるため、影響は更に増えるだろう。

海外調査の結果、気象解析データの鉛直風の誤差の問題に対して、水平風速を元に連続の式を満たすような鉛直風速を求める方法を我々も適用し、本スタディの成果に反映させた。また、航空機の気候への影響評価において化学輸送モデルがなお重要であることや、今後の課題として気候モデルとの結合を目指していることなど、我々の今後の開発の方向性に反映させることができた。

3.2 境界値データベースの作成

3次元化学輸送モデルによる予測計算を行う際に必要となる、化学種ごとにどのような境界条件が適しているかを検討し、その境界値のデータを収集する。収集したデータは、前章で試作した3次元化学輸送モデルによる試計算を行う際に境界条件として用いる。

3.2.1 データ仕様

本スタディで試作する3次元化学輸送モデルで取り扱う化学種について、地表および大気上端における境界条件として、どれが適しているかを化学種ごとに検討した。

本スタディで試作する3次元化学輸送モデルでは、経度方向は周期境界条件（東経180°と西経180°は連続）、緯度方向には極付近の移流をセミラグランジュ法によって取り扱うので問題はないが、地表および大気上端における境界条件については、化学種ごとにどのような境界条件が適しているかを検討し設定する必要がある。境界条件としては以下のものが考えられる。

- 濃度の緯度・経度分布を指定
地表での観測値が十分に得られる化学種の場合、その観測値を面的な分布として与える。また、地表や大気上端で濃度がほとんど0になることがわかっている化学種について、0あるいは計算機で表現できる最小の正の値を設定する。
- 数密度フラックスの緯度・経度分布を指定
地表からの放出量がわかっている化学種の場合、その放出量を面的な分布として与える。また、大気上端での物質の出入りはないと仮定してフラックス=0を設定することもある。
- 沈着速度の緯度・経度分布を指定（地表のみ）
化学種によっては地表との接触によって消滅したり吸着されたりする（乾性沈着）ものがある。このような化学種では、沈着速度というパラメータを設定し、地表面から除去されるフラックスを求める。

各化学種の性質を考慮して検討した結果、大気上端および地表での境界条件を決定し、その仕様に基づいて境界値のデータを収集し、化学輸送モデルに入力できるよう整理した。

収集したデータ³⁾を表3.2.1-1に示す。これは1990年ごろにおけるバックグラウンド微量成分の地表における体積混合比の値である。

表 3.2.1-1 化学種ごとの境界値データ (参考文献 3)

化学種	地表境界条件	上端境界条件
O ₃	30ppbv	flux=0
N ₂ O	310ppbv	flux=0
NO _y	200pptv	flux=0
N ₂ O ₅	57pptv	flux=0
HO ₂ NO ₂	430pptv	flux=0
H ₂ O	3.0ppmv	flux=0
H ₂ O ₂	520pptv	flux=0
H ₂	0.5ppmv	flux=0
CH ₄	1.6ppmv	flux=0
CH ₃ O ₂	20pptv	flux=0
CH ₂ O	30pptv	flux=0
CO	100ppbv	flux=0
CO ₂	345ppmv	flux=0
CH ₃ Cl	600pptv	flux=0
CCl ₄	105pptv	flux=0
CFCl ₃	275pptv	flux=0
CF ₂ Cl ₂	468pptv	flux=0
CH ₃ CCl ₃	150pptv	flux=0
Cly	20pptv	flux=0
CH ₃ Br	1.5pptv	flux=0

3.2.2 収集したデータ

前節に記した境界値データのほか、MOZARTの入力データの中に、いくつかの化学種の地表からのフラックスがまとめられていた。参考のため、これらを図化したものを図 3.2.2-1～図 3.2.2-2 に示す。

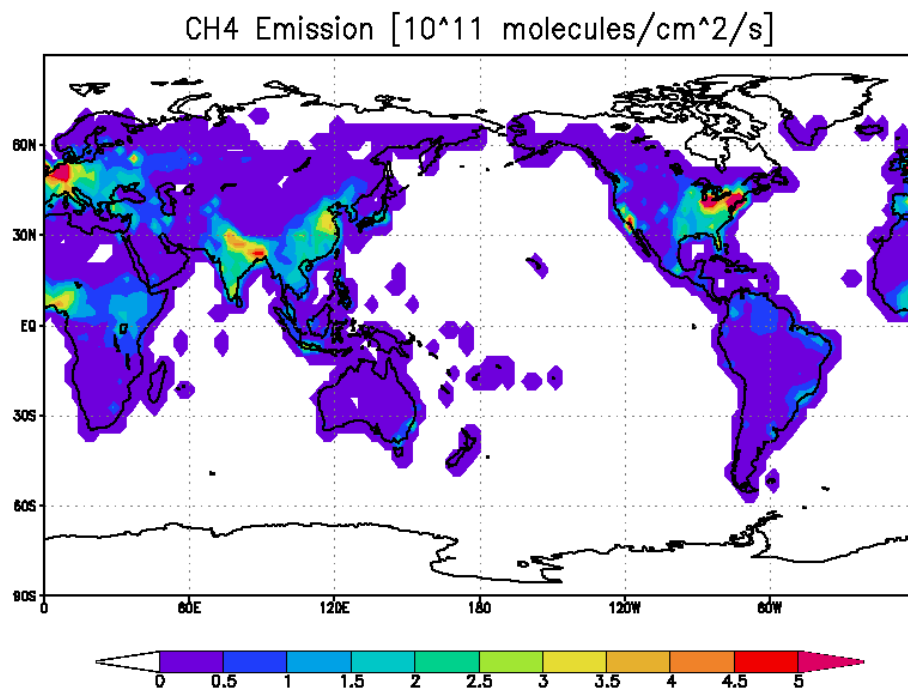


図 3.2.2-1 メタンの排出フラックスデータ

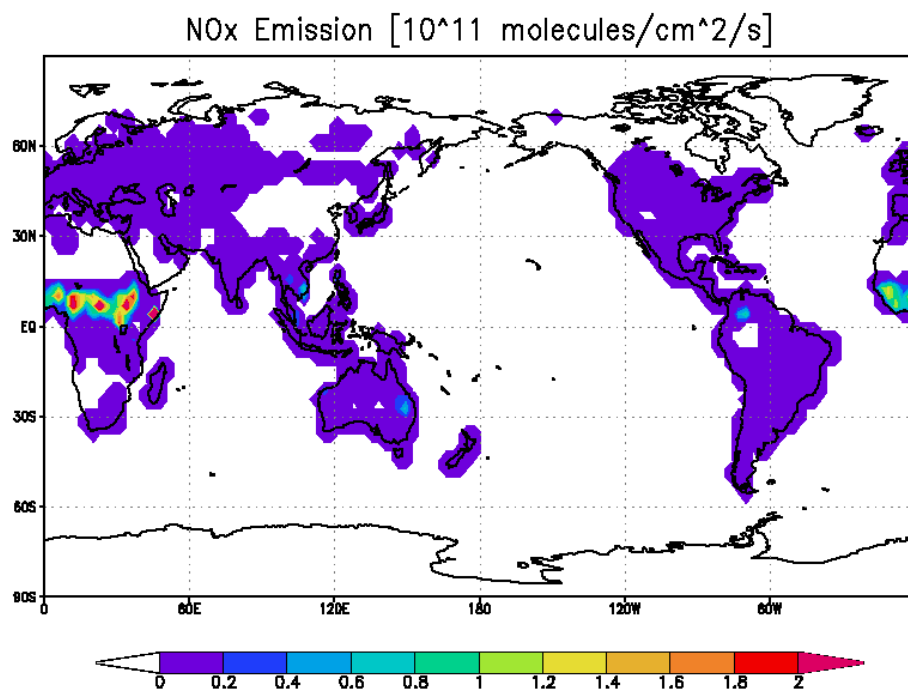


図 3.2.2-2 NO_x の排出フラックスデータ

4 スタディの成果

スタディ結果の概要

航空機は高度 8km 以上の上部対流圏から下部成層圏を飛行するため、そのエンジン排気は対流圏及び成層圏の両方に拡散する可能性がある。航空機のエンジン排気には、二酸化炭素が含まれており、地球温暖化に影響している。また、エンジン排気に含まれる窒素酸化物 (NO_x) は、大気中の光化学反応によってオゾン濃度を変化 (対流圏では主にオゾンを生じ、成層圏ではオゾンを破壊) させたり、間接的にメタン分解を促進したりすることによって、やはり温暖化に影響を与える可能性がある。

このような、航空機が地球温暖化に及ぼす影響については、ICAO (国際民間航空機関) の要請に基づいて気候変動に関する政府間パネル (IPCC) が特別報告書「航空機と地球大気」を 1999 年に取りまとめた。この報告書では、いくつかのシナリオの下で、2050 年までの航空機による潜在的な気候への影響について評価を行った。その結果、二酸化炭素などの排出による影響はかなりよく定量化され理解が進んできている一方で、大気中で起る化学反応群と輸送過程に関する不確実性のために、大気成分に関する理解が精度的に不十分であり、さらなる作業が必要と結論づけられた部分もある。その一つとして、航空機の排出する NO_x がオゾンやメタンの濃度変化に果たす役割が挙げられている。

大気中の物質の濃度は、基本的には適切な化学輸送モデル (CTM: Chemical Transport Model) を用いることによって予測することができる。そこで、航空機の排出物に含まれる NO_x が、大気中のオゾンやメタンの分布に及ぼす影響を定量的に予測するための化学輸送モデルに関する調査研究を実施した。

平成 14 年度から平成 17 年度にかけての調査研究の結果、航空機エンジン排気によるオゾン等の温室効果気体への影響を予測するための 3 次元化学輸送モデルが満たすべき仕様が、その一連の手順を含めて明確になり、実際のモデル開発に着手することが可能となった。

一方、航空機排出物の環境影響を予測するためには、既存の 3 次元化学輸送モデルでは、高度領域や対象化学種、あるいはモデル内で扱うプロセスに関して不十分であることが明らかになった。

化学輸送モデルでは、約 50 種類の化学種の濃度を計算するため、太陽放射による光解離や、気体成分どうしの気相反応、エアロゾルと呼ばれる固体もしくは液体の微粒子の表面で起きる異相反応等、全部で 100 種類以上の反応を扱うことになる。

このような複雑な数値モデル全体をまとめて一気に開発することは大きなリスクを伴う。このリスクを軽減するため、風による物質の移動を模擬する物質輸送モデルの部分と、太陽放射による光解離や化学反応を模擬する化学反応モデルの部分のそれぞれを試作し、問

題がないか確認しながら、段階的に開発を進めることが必要であると判断された。

初年度の平成 18 年度には、この 3 次元化学輸送モデルの一部である物質輸送モデルを試作し、その計算速度や精度について実証した。

以上を踏まえ、2 年目となる本フィージビリティスタディでは、この物質輸送モデルに化学反応を組み込んで化学輸送モデルの試作品を作成し、オゾン等の濃度分布の計算結果が実際の観測値とどの程度一致するかを実証することとした。

図 4.1.1-1 に各年度の研究項目の位置付けを示す。

平成 19 年度は、次のスタディを行った。

(1) 物質輸送モデルの試作

平成 18 年度に開発した 3 次元物質輸送モデルに化学反応を組み込み、3 次元化学輸送モデルの試作品を海外の最新情報を取り込みつつ作成する。この 3 次元化学輸送モデルは、化学種の連続の式（化学反応による生成・消滅項を含む）を数値的に時間積分し、対象化学種の数密度の緯度・経度・高度の 3 次元分布を求めるものである。

まず、開発にあたっての課題を抽出し優先順位を検討して、今年度の作業実施計画を策定し、今年度開発するプロトタイプと本格開発時の 3 次元化学輸送モデルの位置付けを修正した。計算対象とする化学種や化学反応を決定し、化学反応速度係数などのデータを収集して、今年度開発する 3 次元化学輸送モデルのプロトタイプの仕様書を取りまとめた。

対象領域は、3 次元物質輸送モデルと同様、

緯度：北極～南極

経度：西経 180° ～東経 180°

高度：地表～10hPa 面（約 30km）

とし、水平（緯度・経度）解像度は 2.5°、鉛直解像度は約 2km とした。

化学種の種類は 93 種、化学反応 80 種程度を想定し、化学反応には気相反応のほか、光解離や異相反応など全部で 230 種を選定した。

作業計画及び仕様書にしたがって 3 次元化学輸送モデルの開発を行った。入力する気象データとしては、欧州中期気象予報センター（ECMWF）の全球解析データを使用することとし、物質輸送の計算にはセミラグランジュ法的一种であるキュービック・ラグランジュ（CUL）法を用いた。CUL 法で発生する振動に対しては、人工的な数値粘性を付加することで、抑えられることがわかった。

作成した 3 次元化学輸送モデルのプロトタイプを用いて、22 ヶ月間の計算を実施し、その計算速度が要求仕様の範囲内に収まっていることを確認した。また、オゾン等の化学種の濃度分布の計算結果を NASA の「モデルと観測ワークショップ II」の報告書にまとめられている観測値や他のモデルの計算値と比較し、十分によく一致することを検証した。

(2) 境界条件選択機能の試作

3次元化学輸送モデルによる化学物質濃度の予測を行う場合、境界条件を設定しなければならない。本スタディで試作する全球モデルでは、経度方向は周期境界条件（東経 180° と西経 180° は連続）、緯度方向にはフラックスが 0（90° を超える緯度は存在しない）とすればよいが、地表および大気上端における境界条件については、化学種ごとにどのような境界条件が適しているかを検討し設定する必要がある。

そこで、前項で試作する 3次元化学輸送モデルで取り扱う各化学種について、地表および大気上端における境界条件として、以下のうちどの境界条件が適しているかを化学種ごとに検討し境界値データベースの仕様を作成した。

- 濃度の緯度・経度分布を指定
- 数密度フラックスの緯度・経度分布を指定
- 沈着速度の緯度・経度分布を指定（地表のみ）

さらに、3次元化学輸送モデルで取り扱う化学種ごとの境界値のデータを収集・整理し、化学輸送モデルによる検証計算のための入力値として使用した。

以上のスタディの結果、大気成分の濃度について全球スケールでシミュレーションできるモデルの基礎的な部分が完成した。検証の結果は他のモデルと比べて遜色なく、観測値ともよい一致を示している。この結果、航空機のエンジン排気だけに限らず、大気中に放出され長距離輸送される化学物質（例えば酸性雨原因物質や残留性有機汚染物質）の反応を含めた拡散予測や影響評価に利用できると考えられる。

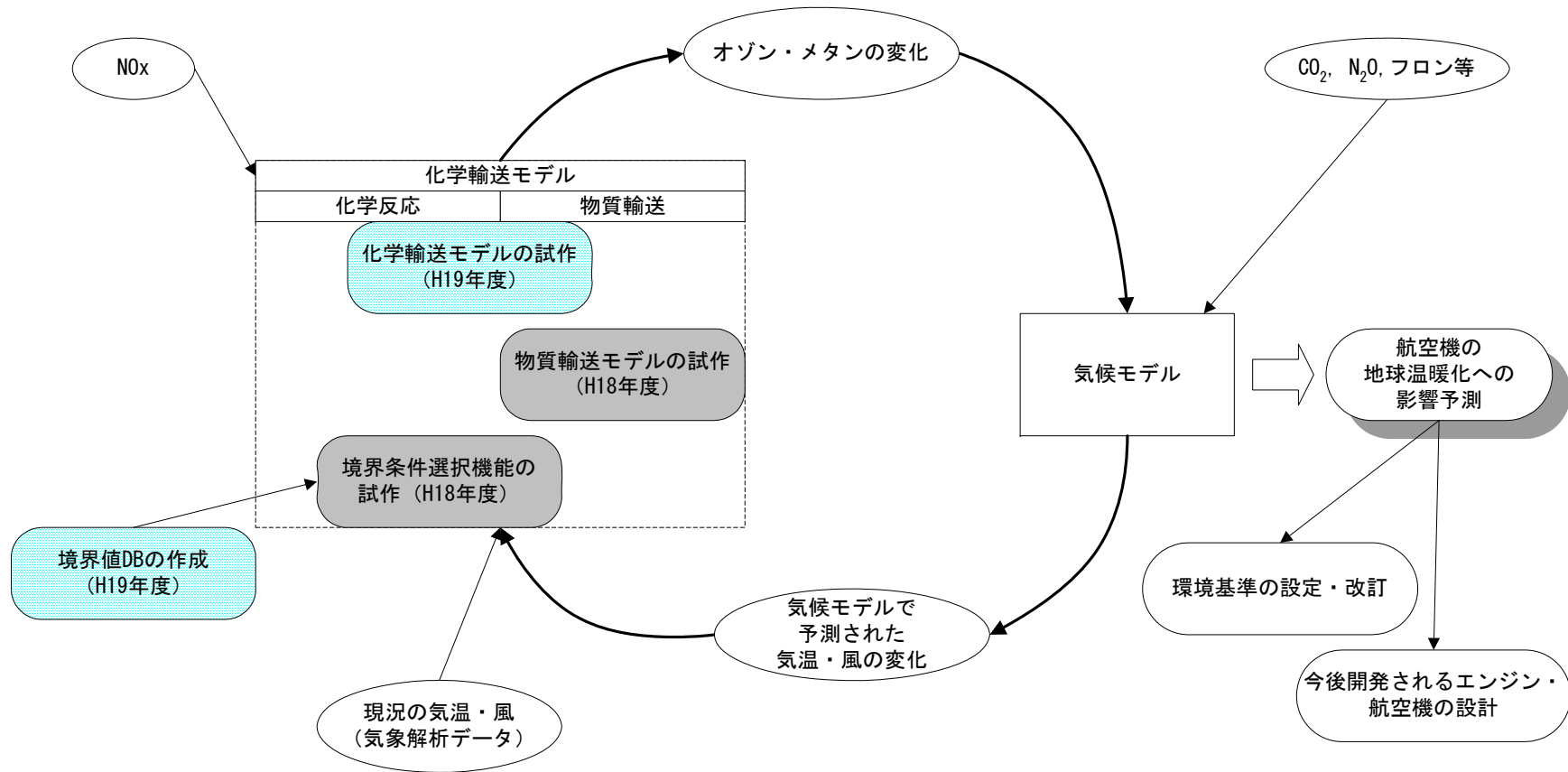


図 4.1.1-1 化学輸送モデル開発に関するスタディの位置付け

5 スタディの今後の課題および展開

2年間にわたる本スタディは、航空機エンジン排気による地球温暖化への影響予測のために、オゾン等の温室効果気体への変動を予測する3次元化学輸送モデルのプロトタイプを作成することによって完了した。しかし、所期の目的から見れば、なお、いくつかの課題が残されている。以下に短期的・中長期的課題を挙げ、今後期すべき展開の方向を示唆しておく。

(1) 短期的課題

この化学輸送モデルに対し、積雲対流による鉛直輸送や成層圏・対流圏間の物質交換、雲や雨水に溶解することによる除去（湿性沈着）など、微量成分の分布に影響を与える過程を組み込み、モデルの精度を向上させることが必要である。

さらに、オゾン層への影響評価を行うためには、モデルの上端を50km程度まで引き上げ、オゾン層全体のシミュレートができるようにしておく必要がある。

一方、より高速な計算ができるようになるためには、並列計算機の技術動向を見据えつつ、分散メモリ型への移行を行っていく必要がある。

これらの作業と併せ、航空機エンジン排気によるオゾン等の温室効果気体の変動予測などの計算を実施し、国内外に向けて成果を発信していくことが不可欠である。

(2) 中長期的課題と今後の展開

本スタディの究極の目的は、民間航空機の開発・生産において、今後我が国が国際共同事業における主体的立場を確保し、戦略的産業である航空機産業の振興、ひいては機械システムの振興に資することにある。そのためには海外及び国内の動向調査などの情報収集を行うことがその活動の基本である。その一方で、航空機の技術開発とともに、航空機が地球温暖化に及ぼす影響を予測する世界と対等以上の技術を保有することが必要である。

これらを念頭に置くと、今後の中長期的課題は以下のとおりである。

- 本スタディで仕様が決定された3次元化学輸送モデルによる予測計算を実施するためには、高速な計算機による大規模計算が不可欠である。そのためには、地球シミュレータ、地球フロンティア等との協力体制を築く必要がある。
- また、今後はさらに気候-化学フィードバック過程を直接的に考慮できるオンライン・モデルの開発へと進む見通しである。海外の動向を常に注視し、それと同等以上のモデルを持つことで、世界におけるわが国の主導的な貢献を果たすことができる。

参考資料-1 参考文献

- 1) J. H. Park, M. K. W. Ko, C. H. Jackman, R. A. Plumb, J. A. Kaye and K. H. Sage: “Models and Measurements Intercomparison II”, NASA/TM-1999-209554, National Aeronautics and Space Administration, Langley Research Center, Hampton, VA, USA, 502 pp. (1999)
- 2) W. B. DeMore, S. P. Sander, D. M. Golden, R. F. Hampson, M. J. Kurylo, C. J. Howard, A. R. Ravishankara, C. E. Kolb and M. J. Molina: “Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling Evaluation Number 12”, NASA JPL Publication 97-4, National Aeronautics and Space Administration, Jet Propulsion Laboratory, and California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA, (1997)
- 3) WMO/UNEP, “Scientific Assessment of Stratospheric Ozone: 1989”, WMO Global Ozone Research and Monitoring Project Report No.20 (1990)

参考資料-2 用語集

異相反応 (heterogeneous reaction)

空気中に浮かぶ固体または液体との化学反応。

エアロソル (aerosol)

大気中に浮遊する固体または液体の微粒子。

気相反応 (gas phase reaction)

気体の化合物どうしの化学反応。

光解離 (photodissociation)

太陽光線 (主として紫外線) による化学反応。

AEAP (Atmospheric Effects of Aviation Program)

「航空機の大気影響」。1995年～2001年に実施された、NASAの航空機環境影響研究プロジェクト。

AER (Atmospheric Environmental Research)

アトモスフェリック・エンバイロンメンタル・リサーチ社 (米国)

AESA (Atmospheric Effects of Stratospheric Aircraft)

「成層圏航空機の大気影響」。1990年～2001年に (1995年以降はAEAPの一部として) 実施されたNASAの超音速航空機の環境影響研究プロジェクト。

CAEP (Committee on Aviation Environmental Protection)

航空機環境保全委員会

CLAES (Cryogenic Limb Array Etalon Spectrometer)

UARS 搭載センサー。HNO₃、ClONO₂、CH₄、N₂O、O₃、CFCl₃、CF₂Cl₂、H₂O、温度、エアロソル、NO、NO₂、NO₂、N₂O₅等を全球規模で計測。

Climatology

気候値。概ね10年程度以上の期間についての平均値。

CONTRAIL (Comprehensive Observation Network for TRace gases by AIrLiner)

日航財団、国立環境研究所などが2006年から実施している定期旅客便による観測計画。

CPU (Central Processing Unit)

中央処理装置。プログラムによって様々な数値計算や情報処理、機器制御などを行うコンピュータにおける中心的な回路。

CSIRO (Commonwealth Scientific and Industrial Research Organization)

豪州連邦科学産業研究機構

CTM (Chemistry Transport Model)

化学輸送モデル

CUL (CUbic Lagrangean method)

キュービック・ラグランジュ法。移流計算方法のセミラグランジュ法の一つで、補間の際に、4つの格子点を通る3次関数を当てはめる点の特徴。

DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt)

ドイツ航空宇宙センター (ドイツ)

ECHAM3/CHEM (GCM developed at MPI-Met in HAMburg based on ECmwf model with CHEMistry module)

ドイツ航空宇宙センター、マックスプランク気象研究所などが開発している3次元大気大循環-化学結合モデル。

ECMWF (European Center for Medium-range Weather Forecast)

欧州中期気象予報センター

GRIB (GRIdded Binary)

WMO が 1995 年に提唱した大量の格子点データの高圧縮パッケージ法、あるいはその方式によって圧縮されたデータの書式。

GRIBEX (GRIdded Binary)

ECMWF が作成した、GRIB データの読み出し・書き込みを行うためのサブルーチン・ライブラリ。

GSFC (Goddard Space Flight Center)

NASA ゴダード宇宙飛行センター (米国)

HARVARD

ハーバード大学 (米国)

HALOE (Halogen Occultation Experiment)

米国の人工衛星 UARS に搭載のセンサー。ClO_y、NO_y、HO_y、O₃、HCl、CH₄、H₂O、

NO、NO₂、CO₂、CFC、HF、エアロゾルを全球規模で計測する。

ICAO (International Civil Aviation Organization)

国際民間航空機構

IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change)

気候変動に関する政府間パネル

JMA (Japan Meteorological Agency)

気象庁 (日本)

JPL (Jet Propulsion Laboratory)

NASA ジェット推進研究所 (米国)

LaRC (Langley Research Center)

NASA ラングレー研究センター (米国)

LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory)

ローレンス・リバモア国立研究所 (米国)

MOZART (Model of Ozone and Related Chemical Tracers)

米国大気研究センター・米国気象海洋庁 地球流体研究所・マックスプランク気象研究所が共同開発した化学輸送モデル。コミュニティー・モデルとしてソースコードが公開されている。

MPI (Max-Planck Institut)

マックスプランク研究所 (ドイツ)

MPI-Met (Max-Planck Institut für Meteorologie)

マックスプランク気象研究所 (ドイツ)

NASA (National Aeronautics and Space Administration)

米国航空宇宙局 (米国)

NCAR (National Center for Atmospheric Research)

国立大気研究センター (米国)

NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration)

国立気象海洋庁 (米国)

NOCAR

NCAR の R. Garcia 博士と NOAA の S. Solomon 博士の共同研究グループ（一般的な名称ではない）

OpenMP

並列コンピューティング環境を利用するために用いられる標準化された基盤。主に共有メモリ型並列計算機で用いられる。

PSC (Polar Stratospheric Cloud)

極域成層圏雲。冬季の極域成層圏で発生する雲。硝酸と水を主成分とするタイプ I と、氷の粒子であるタイプ II がある。その表面で起きる異相反応によって極域春季オゾン減少が起きると考えられている。

SLIMCAT

英国ケンブリッジ大学が開発した 3 次元化学輸送モデル。

SUNY-SPB

SUNY (State University of New York ニューヨーク州立大学) とロシア国立水文気象学研究所 (Russia State Hydrometeorological Institute) の S. P. Smyshlyaev 博士の共同研究グループ（一般的な名称ではない）

UARS (Upper Atmosphere Research Satellite)

1991 年にシャトルから軌道投入された米国の地球観測衛星。ACRIM、CLAES、HALOE、HRDI、ISAMS、MLS、PEM、SOLSTICE、SUSIM、WINDI の 10 センサを搭載している。

UNIVAQ (UNIVersità degli studi l'Aquila)

ラクィラ研究大学 (イタリア)

UTC (Coordinated Universal Time)

協定世界時。国際協定により人工的に維持されている世界共通の標準時。

WMO (World Meteorological Organization)

世界気象機関 (国連)

禁無断転載

システム開発

19 - F - 3

気候モデルと結合した3次元化学輸送モデルによる
予測計算の開発に関するフィージビリティスタディ
報告書
(要旨)

平成20年3月

作成 財団法人 機械システム振興協会
〒108-0073
東京都港区三田一丁目4番28号
電話 03-3454-1311

委託先 財団法人 航空機国際共同開発促進基金
〒105-0001
東京都港区虎ノ門三丁目6番2号
(第2秋山ビルディング)
電話 03-3432-8361