

J-STREAM サブテーマ 3

硫酸塩の冬季過小評価改善に向けたサブモデルの開発

サブテーマ 3 分担者 一般財団法人電力中央研究所 板橋 秀一

サブテーマ 3 リーダー 一般財団法人電力中央研究所 速水 洋

以下に述べる修正コードは CMAQ version 5.0.2 および version 5.2.1 に基づいている。

該当する修正コードは、CCTM の下記のディレクトリ

CMAQv5.0.2/models/CCTM/cloud/cloud_acm_ae6 あるいは CMAQv5.2.1/CCTM/src/cloud/acm_ae6

以下の aqchem.F および AQ_DATA.F のフォートランプログラム 2 点と、

モデル計算で選択される化学反応メカニズム

CMAQv5.0.2/models/CCTM/MECHS あるいは CMAQv5.2.1/CCTM/src/MECHS

以下の GC_*.nml ファイルである。

修正コードの末尾に付記した v5.0.2 あるいは v5.2.1 は CMAQ のバージョンを示す。

オリジナルのプログラムについては、

```
!###
```

を用いてコメントアウトしており、削除はしていない。修正された部分については、

```
! developed in J-STREAM Sub-Theme 3
```

と記述した上でコーディングするようにした。

修正コードについては、以下の 4 通りを用意した。

1. および 2. : 溶存酸素による液相酸化過程の改良,
3. : NO₂ による液相酸化過程の追加,
4. : 両者を考慮したもの,

であり、4. が最も硫酸塩濃度を増加させる方向に働く。

本修正コードの詳細や検証結果については、参考文献として挙げている 2 点の論文を参考にしていただき、学術論文などで本サブモデルプログラムを使用される際には謝辞などは特に不要であるが、1. および 2. については 1) を、3. および 4. については 2) を参考文献として挙げていただければ幸いである。

本修正コードに関する質問、あるいはフィードバックについては、板橋 (isyuichi@criepi.denken.or.jp) までぜひお願いしたい。

1. 鉄とマンガンの可溶性の増大

aqchem.F.J-STREAM_detailed-solubility

説明)

溶存酸素による鉄とマンガンに触媒にした液相酸化過程において、鉄とマンガンの可溶性をそれぞれ 10%と 50%のデフォルトの設定から、文献値に基づいて、最大値として考えられうる 25%と 100%に増加させたもの

なお、鉄の可溶性については人為起源とダスト起源を分けるようにし、ダスト起源については文献値に基づき可溶性を 1%と低下させている

使用方法)

aqchem.F に当プログラムに置き換え、あるいはリンクした上で、再コンパイル

2. 1. +pH を考慮した反応速度定数への変更

aqchem.F.J-STREAM_detailed-solubility_mod-O2-oxidation

説明)

1. に加え、溶存酸素の反応速度定数について pH 依存性をもつものに変更したもの

使用方法)

aqchem.F に本プログラムに置き換え、あるいはリンクした上で、再コンパイル

3. 液相酸化過程の追加

aqchem.F.J-STREAM_add-aq-NO2

AQ_DATA.F.J-STREAM_add-aq-NO2

GC_*.nml または **GC_*.csv** (*は化学反応メカニズム)

説明)

CMAQ で考慮されている 5 つの液相酸化過程に加え、NO₂ による酸化過程を加えたもの

使用方法)

・ aqchem.F および AQ_DATA.F に本プログラムに置き換え、あるいはリンク

・ 該当する化学反応メカニズム CMAQv5.0.2/models/CCTM/MECHS/(例えば, saprc07tc_ae6st_aq)

について、ビルド時に指定した nml ファイルまたは csv ファイルのガス成分に関わるファイル (例えば, GC_saprc07tc_ae6st_aq.csv) を置き換える

この変更点は、液相反応過程に変数を使用できるように G2AQ_SUR に追記をしたものである (下記の例の赤字)

オリジナル：

NO2,46.0,NO2,1.0,,,VD_NO2,1.0,NO2,1.0,NO2,,Yes,Yes,Yes,Yes

修正後：

NO2,46.0,NO2,1.0,,,VD_NO2,1.0,NO2,1.0,NO2,**NO2**,Yes,Yes,Yes,Yes

(上記は version 5.2.1 では CMAQv5.2.1/CCTM/src/MECHS 以下について同様であるが, version 5.2.1 では.nml ファイルのみを取り扱うように変更されている)

・以上の 2 点を実施した後に再コンパイル

4. 2. および 3. の両者の影響を考慮したもの

aqchem.F.J-STREAM_detailed-solubility_mod-O2-oxidation_add-aq-NO2

AQ_DATA.F.J-STREAM_add-aq-NO2

GC_*.nml または **GC_*.csv** (*は化学反応メカニズム)

説明)

鉄とマンガンの可溶性の増加 (1.) および反応速度定数の pH 依存性の考慮 (2.), さらに既存の 5 つの液相酸化過程に加えて, NO₂ による酸化過程を加えた (3.) もの

使用方法)

3. の使用方法を参考のこと

参考文献)

1) Itahashi, S., Yamaji, K., Chatani, S., Hayami, H.

Refinement of modeled aqueous-phase sulfate production via the Fe- and Mn-catalyzed oxidation pathway
Atmosphere, 9, 132, doi:10.3390/atmos9040132 (2018)

2) Itahashi, S., Yamaji, K., Chatani, S., Hisatsune, K., Saito, S., Hayami, H.

Model performance differences in sulfate aerosol in winter over Japan based on regional chemical transport models of CMAQ and CAMx

Atmosphere, 9, 488, doi:10.3390/atmos9120488 (2018)

余談)

デフォルトの CMAQ では AQ_DATA.F において液相酸化過程のベースとなる二酸化炭素濃度が 340 ppmv と設定されている。現在の二酸化炭素濃度とは異なるため、気になる場合には適宜修正されたほうがいい。なお、400 ppmv 等に修正された場合に、硫酸塩などの大気中濃度への影響はほとんどないことを確認している。

以上