

II-390

微量化学物質の地球規模における輸送/反応に関する第二世代モデルについて

豊橋技術科学大学 学生会員 黒田忠弘
 豊橋技術科学大学 正会員 北田敏廣

1. 序論

最近、温室効果による地球大気の温暖化、フロンガス等による成層圏オゾン層の破壊など、地球規模での大気環境問題が注目を集めている。筆者らは、10年程前に一酸化炭素(CO)とメタン(CH₄)の地球規模における濃度分布を予測すべく、簡単な化学反応系を組み込んだ輸送モデルを提案した(1980,1982)。その後、大気化学が急速な発展を見るとともに、各種一次汚染物質の排出源分布に関する情報も格段に充実してきた。本研究は、このような情勢の下で最近の大気化学の知見を取入れ、詳細な化学反応系(約140の気相化学反応から成る)を組み込んだ空間三次元の移流/拡散/反応モデルを提案するものである。また、モデルの応用として森林起源の炭化水素が地球規模のCO分布に及ぼす影響を調べる。

2. 地球規模モデル

2-1 基礎方程式系

大気中での化学物質の輸送方程式は、球座標を用いて次のように書ける。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial X_i}{\partial t} + \frac{u}{r \cos \theta} \frac{\partial X_i}{\partial \phi} + \frac{v}{r} \frac{\partial X_i}{\partial \theta} + w \frac{\partial X_i}{\partial r} \\ & = \frac{1}{r^2 \cos^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\epsilon_\phi \frac{\partial X_i}{\partial \phi} \right) + \frac{1}{r^2 \cos \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\cos \theta \epsilon_\theta \frac{\partial X_i}{\partial \theta} \right) \dots \dots (1) \\ & + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \epsilon_r \frac{\partial X_i}{\partial r} \right) + R_i(X_1, X_2, \dots, X_{61}) + S_i \\ & \qquad \qquad \qquad i = 1, 2, 3, \dots, 61 \end{aligned}$$

ここで、 X_i は第 i 番目の化学種の濃度、 R_i は化学反応項、 S_i は排出項である。(1)式はさらに、鉛直方向に無次元化した座標系 ρ ($\rho = (r - h(\phi, \theta)) / \Delta H(\phi, \theta)$) により書き直されている。

2-2 計算領域と境界条件

計算領域は地表面と圏界面によって境界づけられた三次元空間、すなわち対流圏である。この領域が水平方向に $5^\circ \times 5^\circ$ 、鉛直方向に9層の格子点網により近似されている。なお、下層大気中での鉛直混合および地表排出源の影響を詳細に知るために、下層で密な不均一鉛直グリッドを採用している。また、上方境界では成層圏との間に、下方境界では陸、海との間に物質移動を考慮した境界条件を用いる。

2-3 化学反応モデル

本研究で用いる気相化学反応系は汚染質の長距離輸送用モデル(Lurmann et al., 1986)を基礎に、植物性炭化水素すなわちイソプレン、 α ピネン系の化学反応機構(Lloyd et al., 1983)を組み込んだものである。大気中におけるCOの生成にはNMHC、中でも森林等から排出されるイソプレンおよびテルペン類の酸化によるものが重要である。これらの反応性は高く、また排出量も多いため、特に熱帯域で大気中の化学反応に重要な影響を与える。

イソプレン、 α ピネンは、主として次のような反応経路を経てCOを生成する。

表1 イソプレン、 α ピネンの酸化によるCO生成の反応機構

$\text{OH} + \text{Isopren}$	$\rightarrow 0.9\text{NO}_2 + 0.9\text{HO}_2 + 0.9\text{HCHO} + 0.45\text{MVK} + 0.45\text{MACR} - \text{NO}$
$\text{O}_3 + \text{Isopren}$	$\rightarrow 0.5\text{HCHO} + 0.2\text{MVK} + 0.3\text{MACR} + 0.2\text{CH}_2\text{OO} + 0.06\text{HO}_2 + 0.2\text{CO} + 0.2\text{MVKOO} + 0.3\text{MAOO}$
$\text{O}_3 + \text{MVK}$	$\rightarrow 0.5\text{HCHO} + 0.5\text{MGLY} + 0.2\text{CH}_2\text{OO} + 0.2\text{CO} + 0.21\text{HO}_2 + 0.2\text{MCRIG} + 0.15\text{ALD}_2 + 0.15\text{MCO}_3$
$\text{O}_3 + \text{MACR}$	$\rightarrow 0.65\text{HCHO} + 0.5\text{MGLY} + 0.2\text{CH}_2\text{OO} + 0.35\text{CO} + 0.36\text{HO}_2 + 0.2\text{MCRIG} + 0.15\text{NO}_2 - 0.15\text{NO}$
$\text{OH} + \text{MACR}$	$\rightarrow 0.9\text{NO}_2 + 0.9\text{HO}_2 + 0.9\text{HCHO} + 0.9\text{MGLY} - \text{NO}$
$\text{HCHO} + \text{h}\nu$	$\rightarrow 2\text{HO}_2 + \text{CO}$
$\text{HCHO} + \text{h}\nu$	$\rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$
$\text{HCHO} + \text{OH}$	$\rightarrow \text{HO}_2 + \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
$\text{MGLY} + \text{h}\nu$	$\rightarrow \text{MCO}_3 + \text{HO}_2 + \text{CO}$
$\text{MGLY} + \text{OH}$	$\rightarrow \text{MCO}_3 + \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
$\text{OH} + \text{PINENE}$	$\rightarrow \text{NO}_2 + \text{HO}_2 + \text{PCHO} - \text{NO}$
$\text{PCHO} + \text{h}\nu$	$\rightarrow \text{ALD}_2 + 2\text{HO}_2 + \text{NO}_2 - \text{NO}$
$\text{PCHO} + \text{h}\nu$	$\rightarrow \text{ALD}_2 + \text{MVK}$
$\text{ALD}_2 + \text{h}\nu$	$\rightarrow \text{MO}_2 + \text{HO}_2 + \text{CO}$
$\text{ALD}_2 + \text{h}\nu$	$\rightarrow \text{CH}_4 + \text{CO}$

2-4 排出源モデル

NO_x , NH_3 , CH_4 , NMHC (イソプレン, α ピネンを含む), COの地球規模での排出源分布を最近の文献により調査した。例えば CH_4 の排出源では (a) 湿地や水田での有機物の嫌気性分解、(b) 動物の腸内発酵、等が支配的である。本研究では、 CH_4 の年間排出量として湿地、水田での嫌気性分解によるものをそれぞれ110Tg/yr (Matthews et al., 1987), 95Tg/yr (Khalil et al., 1983)、動物の腸内発酵によるものを75.8Tg/yr (Lerner et al., 1988) とし、これらの値を湿地、水田、動物の分布等に応じて各格子点に配分した。

3. 気象場

チェルノブイリ原発事故時 (1986年4~5月) の全球規模流れ場、気温場を用いる。これらのデータは、2日毎に初期化したGCM (気象研究所) のアウトプットである。

4. 予備的結果 反応モデルの検証

本研究で用いる化学反応モデルでの計算結果と、スモッグチャンバー実験結果 (Lloyd, Atkinson, 1983) との比較を図1に示す。これは NO_x / α ピネン系反応試験の結果であるが、各物質とも観測結果と同じ濃度変化傾向を示し、またピーク値もほぼ一致していることから反応モデルの妥当性を示すものと考えられる。 NO_x は森林の土中からも排出されているために、熱帯域上空の O_3 生成に植物性炭化水素が大きく寄与する可能性がある。すなわち、局地的にはイソプレン、 α ピネンが大気中の化学反応に重要な影響を及ぼすことを示唆する。

5. おわりに

以上、本研究で提案する地球規模の移流/拡散/反応モデルの概要と、予備結果として反応モデルの検証について述べた。空間三次元モデルを使つての実際の計算結果は発表時に述べる。

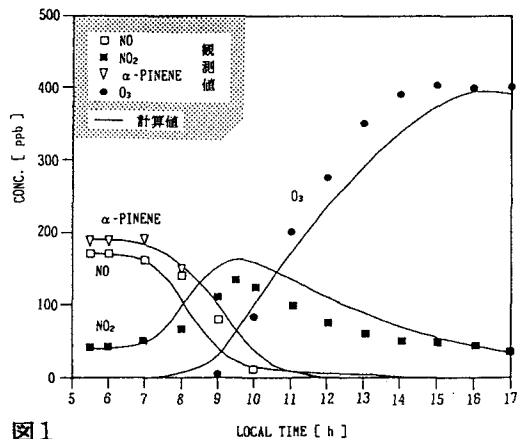


図1 観測結果と反応モデルによる計算結果との比較