

研究課題名：気候モデル中の物理化学諸過程の高度化及び過去-現在気候の再現実験を通じたモデルの検証

課題代表者：国立環境研究所アジア自然共生研究グループ 永島達也

共同研究者：国立環境研究所大気圏環境研究領域 野沢 徹・秋吉英治・菅田誠治・塩竈秀夫・中村 哲・川瀬宏明

九州大学応用力学研究所 竹村俊彦

名古屋大学大学院環境学研究科 須藤健悟・高瀬健太郎・関谷高志・井上忠雄

東京大学気候システム研究センター 高橋正明・山下陽介・笹田将矢

実施年度：平成 19 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

本課題では、次期 IPCC レポートや WMO オゾンアセスメント等への貢献を見据えた地球システム統合モデル開発一端を担う目的の下、大気化学・エアロゾル過程を高度化し、過去・現在気候の再現実験を通じた統合モデルの調整と検証を行う。また、上記の過程で計算される過去・現在の気候再現計算の結果や、既存の各種モデルを用いた実験の結果を利用して、気候変動・気候変化のメカニズム研究も行う。

2. 研究計画

今年度は、昨年度までにそれぞれ高度化された対流圏化学モデルと対流圏エアロゾルモデルの統合方針を確定させ、最終的な統合作業を行う。更にそれをベースに成層圏化学過程を組み込んで、対流圏・成層圏大気化学・エアロゾル過程を全て含みそれらの相互作用に陽に表現することが可能な地球システム統合モデルを完成させる。高度化された統合モデルを用いて過去・現在の気候再現実験を行い、観測データや既存モデルの結果を使った検証と調整を行う。

3. 進捗状況

昨年度までにそれぞれで高度化が行われた対流圏化学過程と対流圏エアロゾル過程の統合に関して、両過程で結合が必要な化学変数（オゾン、OH、H₂O₂、SO₂、SO₄）の受け渡しや計算の分担に関して方針を確定して統合作業を完了させた。これに加えて、これまでに本課題において仕様の確定がなされている成層圏化学過程を統合し、地球システム統合モデルの大気化学・エアロゾル関連の全統合が完了した。現在、当課題の成果を組み込んだ地球システム統合モデルの開発は別機関で続けられており、陸上の各種プロセスを組み込み、最終調整に進んでいる。

一方、今年度はこれまでに既存のモデルを用いて以下のような研究が行われた。

[1] 成層圏化学気候モデルの相互比較プロジェクト (CCMVal) へのデータ提出を目的として、成層圏化学気候モデルを用いた将来予測実験 (1960-2100) の感度実験を行った。将来に関して、GHG を増加させない場合、GHG のみを増加させる場合、GHG の増加シナリオを変えた場合 (×2)、ODS を増加させ続けた場合、の 5 実験を行っている (現在も進行中)。

[2] 全球エアロゾルモデルの相互比較プロジェクト (AeroCom) へのデータ提出を行うべく、同プロジェクトで独自に用意された排出量推計値と、次期 IPCC レポートに向けて整備された排出量推計値を用いて、1980 年から 2008 年までの対流圏エアロゾル過去再現実験を行った。

[3] 大気海洋結合モデルを用いて、エアロゾルの第 2 種間接効果による“瞬時”降水量変化を診断する新手法を開発した。炭素性エアロゾルを変化させた実験で見積もったところ、全球平均降水量変化の約 1/3 は、第 2 種間接効果による“瞬時”降水量変化であることがわかった。

[4] オゾン前駆物質 (NO_x や VOC 等) の発生源別寄与率評価を行う際に使用される 2 つの異なる手法の違いを評価するため、特に東アジア域の発生源に関して感度実験を行った。

4. 今後の計画

今年度までの研究により、地球システム統合モデルの大気化学・エアロゾル関連の全統合が完了したが、次期 IPCC レポートや今後予定されている幾つかのモデル間相互比較プロジェクトへの参加に向けて調整が必要な部分 (成層圏オゾンホールなど) が残っており、パラメーターの調整などを適宜進めていきたい。

5. 計算機資源の利用状況 (2009 年 4 月～9 月)

実行ユーザ数: 15 CPU 時間 1 ノード未満: 432 hours,
1 ノード: 224,577 hours, 2 ノード: 46,330 hours,
計: 271,339 hours

研究課題名：流域環境管理に関する国際共同研究

課題代表者：国立環境研究所アジア自然共生研究グループ 村上正吾

共同研究者：国立環境研究所水圏環境研究領域 林 誠二・中嶋恵子

国立環境研究所アジア自然共生研究グループ 東 博紀

実施年度：平成 19 年度～平成 23 年度

1. 研究目的

アジア自然共生研究プログラムでは、陸域～沿岸域～海洋を含む領域で定義される広義の流域圏における多種多様な生態系機能及び水・物質循環機構の解明と、流域の土地改変や社会経済活動変化に伴う負荷発生構造の変化、沿岸域の貧酸素水塊の形成等、海洋生態系変化に伴う生物生産への影響等を定量的に評価することを目的として、流域圏環境・生態系機能評価モデルの開発を行う。

2. 研究計画

我々はこれまで陸域の水・物質循環モデルの開発に重点的に取り組み、長江流域においてその妥当性を検証するとともに、構築した数理モデルを応用して洞庭湖周辺における退田還湖や三峡ダムの建設による水・土砂・物質流出特性への影響評価を行った。今年度は陸域起源の環境負荷物質が沿岸・海洋生態系に及ぼす影響を評価するための数理モデルの開発に着手した。

3. 進捗状況

今年度は海域の水・物質循環機構及びそれに関与する生態系機能を解明する目的で、我国の代表的な閉鎖性海域である伊勢湾を対象に湾内流動・水質・一次生産モデルの開発・高精度化を行った。伊勢湾は毎年のように赤潮・貧酸素水塊が発生している我が国の代表的な閉鎖性海域であり、総量規制など環境保全に向けた取り組みが行われているものの、ここ 30 年間の湾内平均水質はほぼ一定で改善の傾向は見られない。本研究では構築した数理モデルを応用し、湾内水質の長期変動と流動の支配要因である気象条件の経年変化の関係性を数値シミュレーションをとおして検討した。

1981～2004 年において環境省が実施した広域総合水質調査の底層 COD データを統計解析したところ、伊勢湾では愛知県側で増加、三重県側で減少トレンドとなる空間分布が見られた(図 1a)。また、同期間の気象データを調べたところ、気温は 24 年間で約 1.4℃の昇温傾向、伊吹おろしと呼ばれる冬季の北西風が弱まっている傾向が明らかになった。一級河川の流量には特に有意なトレンドは見出せなかった。気象の経年変

化が湾内流動・底層水質に及ぼす影響を流動・水質・一次生産モデルを用いて検討した。2003 年の再現計算結果と気温、風のみ 1988 年の時系列データに変えて得られた結果を比較したところ、(1) 気温の上昇傾向は流動・水質にほとんど影響を及ぼさないが、伊吹おろしの弱風化は南北方向のエスチュアリー循環を減速・時計回りの循環流を加速させること、(2) 底層 COD のトレンドの空間分布は風の経年変化が重要な要因である可能性が高いこと(図 1b)、(3) 愛知県側の増加傾向はエスチュアリー循環の減速による海水交換速度の低下、三重県側の減少傾向は時計回り循環流の加速による湾奥からの栄養塩輸送量の減少・内部生産量の減少が原因であることなどが明らかになった。

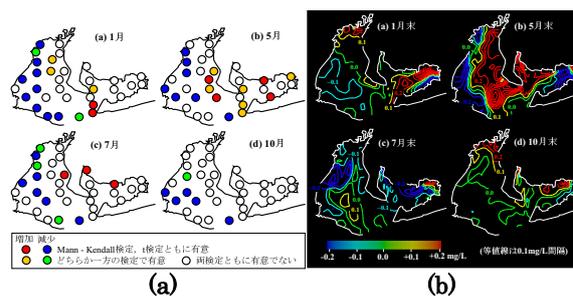


図 1 (a) 広域総合水質調査結果の底層 COD トレンド。(b) 風向・風速の変化が底層 TOC に及ぼす影響。等値線は 2003 年再現計算(W03)と風向・風速のみ 1988 年の時系列に代えて行った数値シミュレーション(W88)の底層 TOC の差(W03-W88)。

4. 今後の計画

干潟・浅海域における水質浄化機能を評価するため、二枚貝などの底生生物機能をモデル化し、今年度構築した海域の流動・水質・一次生産モデルに組み込む。昨年度までに開発された陸域モデルと海域モデルを結合して流域圏環境・生態系機能評価モデルを構築し、その妥当性を検証する。モデルを応用して流域圏管理シナリオシミュレーションを実施し、陸域～沿岸域～海洋の総合的環境保全の基礎的枠組みの提示を目指す。

5. 計算機資源の利用状況 (2009 年 4 月～9 月)

実行ユーザ数: 3 CPU 時間 1 ノード未満: 0 hour,
1 ノード: 0 hour, 2 ノード: 0 hour, 計: 0 hour

研究課題名：海水面および海中での物質の乱流拡散機構の解明と海水面を通しての物質の交換機構に及ぼすうねりの効果

課題代表者：京都大学大学院工学研究科 小森 悟
 共同研究者：京都大学大学院工学研究科 黒瀬良一・高垣直尚
 実施年度：平成 21 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

地球温暖化およびそれに伴う異常気象の発生や海洋汚染の予測を正確に行ううえで、大気・海洋間での炭酸ガスなどの物質の交換速度を正確に評価することは極めて重要である。本研究では、うねりを伴う風波気液界面に対して直接数値計算（DNS）を適用することにより、うねりが海水面近傍の乱流構造や物質輸送に及ぼす影響を明らかにし、その影響をモデル化することを目的とする。

2. 研究計画

本研究では、気液界面を壁面とみなすことなく移動・変形する風波気液界面を再現可能な気液二相流の DNS を行い、風波気液界面近傍の乱流構造および物質交換機構について詳細に調べた後、より正確な物質交換モデルの考案を試みる。

3. 進捗状況

昨年度は移動・変形を伴う風波気液界面を再現可能な気液二相流の DNS コードの開発に成功した。そこで今年度は、界面形状を平滑面に固定し風波を発生させない平滑気液界面に対する計算を併せて実施し、それとの比較によって風波気液界面近傍の乱流構造とスカラ輸送機構を詳しく調べている。以下では、風波および平滑気液界面近傍の乱流場をそれぞれ風波乱流場、平滑乱流場と呼ぶ。

図 1 に $t = 4.5\text{s}$ における風波乱流場および平滑乱流場での気液界面を通しての局所スカラフラックスの瞬間分布をそれぞれ示す。図より、局所スカラフラックスは風波乱流場の方が平滑乱流場より高い値をとることがわかる（カラーレンジが異なることに注意されたい）。また、風波乱流場と平滑乱流場の局所スカラフラックス分布にはともに主流方向にストリーク状の低い値をとる領域が存在するが、その低局所スカラフラックスストリークは風波乱流場の方が非一様に分布していることもわかる。このような低局所スカラフラックスストリークは、液側の界面近傍に発生するバースティング運動に寄与する縦渦型の（主流方向に軸をもつ）乱流渦が界面近傍のスカラを更新するために現れること

が知られている。従って、風波乱流場では、波動運動が乱流の発達を促進し、液側の界面近傍におけるバースティング運動の発生を活発にするため、平滑乱流場に比べて局所スカラフラックスが高く、低局所スカラフラックスストリークが非一様に分布するようになると考えられる。このことは、図 2 に示したスカラ濃度の $x-z$ および $y-z$ 断面分布の時間変化からも確認できる。風波乱流場のスカラは気液界面から縦渦を意味するマッシュルーム状に巻き込まれながら下方へと輸送されることがわかる。

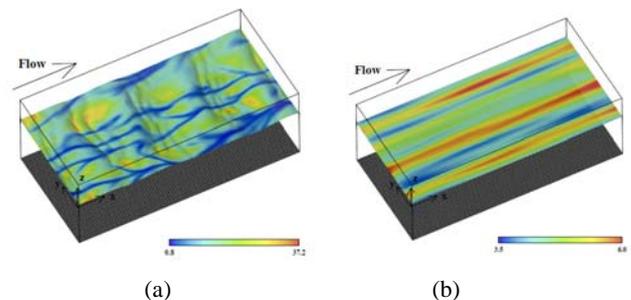


図 1 局所スカラフラックスの瞬間分布。(a) 風波乱流場。(b) 平滑乱流場。

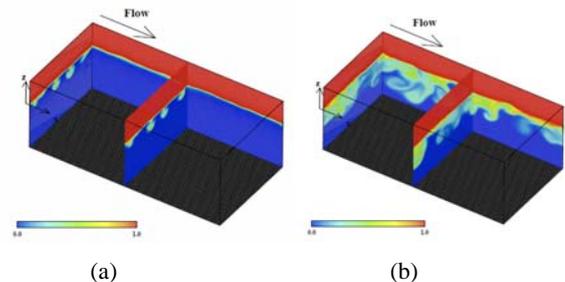


図 2 スカラ濃度の $x-z$ および $y-z$ 断面分布（風波乱流場）。(a) $t = 3.0\text{ s}$ 。(b) $t = 5.0\text{ s}$ 。

4. 今後の計画

これまでの研究により、風波気液界面を通してのスカラ輸送は液側流動場の縦渦を伴うバースティング運動により強く支配されることが示された。しかし、さらに風速が上がると、風波の発達に伴って横渦型の（スパン方向に軸をもつ）乱流渦が顕著になることが予想される。従って、今後は、より風速が高い条件下にお

ける縦渦と横渦の関連性や、それがスカラ輸送に及ぼす影響を明らかにしていく予定である。

5. 計算機資源の利用状況 (2009 年 4 月～9 月)

実行ユーザ数: 3 CPU 時間 1 ノード未満: 55 hours,
1 ノード: 12,305 hours, 2 ノード: 0 hour,
計: 12,360 hours

6. 昨年度研究課題のまとめ

6.1. 昨年度研究課題名

海水面および海中での物質の乱流拡散機構の解明と海水面を通しての物質の交換機構に及ぼすうねりの効果

6.2. 昨年度研究課題の目的

今年度と同様。

6.3. 昨年度研究課題の成果概要

6.3.1 目的

移動・変形する風波気液界面近傍の乱流場とスカラ場を再現可能な気液二相流の DNS コードを開発する。

6.3.2 計算方法

図 3 に計算領域の概略を示す。界面を追跡する手法として ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) 法を用いた。x、y、z 方向をそれぞれ主流、スパン、鉛直方向として、気液界面を挟んで鉛直上側を気相、鉛直下側を液相とした。計算領域および格子点数は主流、スパン、鉛直方向にそれぞれ $8\delta \times 4\delta \times 3\delta$ 、 $200 \times 100 \times 180$ とした。また、支配方程式の数値解法には有限差分法に基づく MAC 法を用いた。初期気側一様流速 $U_{\infty,ini}$ を 5.2 m/s、初期気側摩擦速度 u^* を 0.25 m/s とした。

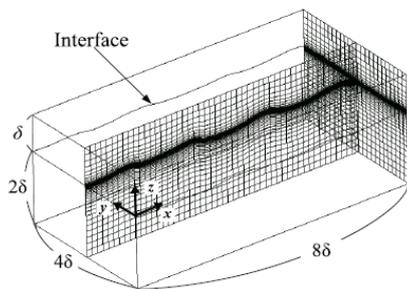


図 3 計算領域と計算格子。

6.3.3 計算結果および考察

図 4 に吹送時間 $t = 4.5s$ における風波気液界面形状を示す。3 次元的な風波が発達しており、風波の下流側

斜面にはリップルが形成されていることが確認できる。この結果は、低風速域の室内実験において観測される風波と一致する。図 5 に $t = 4.5s$ における液側流動場の第二不変量の等値面を示す。図は、計算領域の下側から見たものである。界面近傍には馬蹄形渦が見られ、一般的な壁面乱流場によく見られるバースティング運動が発生していることがわかる。また、風波の下流側で形成されるリップルによって強い渦が形成されていることもわかる。

さらに、気液界面から液流側にスカラを浸透させる計算を行い、風波気液界面を通してのスカラ輸送機構と界面近傍液側の乱流構造との関連性について検討を行った。図 6 に $t = 4.5s$ における気液界面を通しての局所スカラフラックスの瞬間分布を示す。風波気液界面を通してのスカラフラックスは、ストリーク状に低い値をとり、液側乱流が強い値を示す風波の下流側斜面において高い値をとることがわかる。これらの現象は、液側のバースティング運動やリップルの存在に起因するものと考えられる。

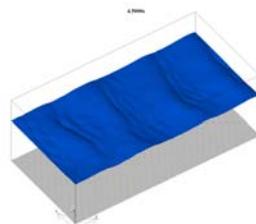


図 4 風波気液界面形状。

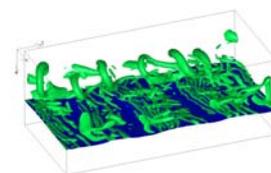


図 5 液側流動場の第二不変量の等値面。

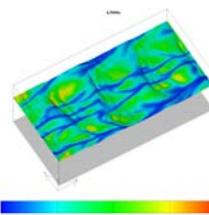


図 6 局所スカラフラックスの瞬間分布。

6.4. 昨年度計算機資源の利用状況

実行ユーザ数: 3 CPU 時間 1 ノード未満: 992 hours,
1 ノード: 38,396 hours, 2 ノード: 0 hour,
計: 39,387 hours

研究課題名：大気海洋結合モデルの物理過程改良および気候変化予測の手法開発

課題代表者：国立環境研究所地球環境研究センター 小倉知夫

共同研究者：国立環境研究所地球環境研究センター 江守正多・長谷川 聡・阿部 学
 東京大学気候システム研究センター 木本昌秀・近本喜光・今田（金丸）由紀子・
 野中（荒井）美紀・高森 縁・羽角博康
 海洋研究開発機構 横島徳太

実施年度：平成 19 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

地球温暖化が社会・経済に及ぼす影響を把握する上で、今後 30 年程度の近未来に注目した極端現象の予測は気候感度の不確実性低減と共に重要な課題である。しかし、上記の課題を達成するには気候モデルによる経年変動の再現性改善、初期値アンサンブル予測の手法開発などの問題を克服する必要がある。そこで本研究では、大気海洋結合 GCM “MIROC” による数値実験とその物理・力学過程の改善を通して、近未来の気候変化予測の技術的基盤を確立すること、及び気候感度推定の信頼性を向上することを目的とする。

2. 研究計画

近未来の気候変化を 10 年規模変動の位相を含めて予測するための研究ツールとして、実験的気候予測システム (System for Prediction and Assimilation by MIROC, “SPAM”) が昨年度から稼動を開始した。今年度は SPAM を用いた将来予測において初期値を生成する方法に注目し、計算コストの縮小を図る等、システムの改善を進める。また、将来予測に用いる GCM の性質（気候感度等）を検証するために、火山噴火に対する気候応答を観測と GCM で比較する準備を整える。

3. 進捗状況

SPAM を用いた近未来予測実験は大気海洋結合 GCM を高解像度で複数回走らせるという性質上、計算コストの高いことが問題となる。そこで、計算コストが比較的安く、かつ近未来予測に適した初期値作成手法を開発した。この手法は同化実験 1 メンバーから得られた解析インクリメントを用いて初期値と初期摂動を求める簡便な方法である (Analysis Increment Perturbation, AIP 法)。データ同化実験を複数メンバー行う従来の方法（アンサンブル同化）と比べるとコストが格段に低い利点がある。

AIP 法を用いた十年規模変動の予測実験 (AIP 予測) と従来のアンサンブル同化 10 メンバーによる予測実験 (CTL 予測) を比較したところ、モデルによって再現された北太平洋における主要な水温変動について

AIP 予測は CTL 予測と同程度の予測精度を示した。特に 1975 年以降を初期値とした予測成績は良好であり、AIP 法の有効性を示唆するものであった。

一方、将来予測に対する信頼性を高めるためには、過去に起きた火山噴火に対する気候の応答を GCM が良好に再現できることも重要である。IPCC 第 4 次報告で使用されたバージョンの MIROC では、火山噴火の影響は簡便のために大気中の 1 層 (50 hPa) における光学的厚さの変化で表現された。本研究では 1991 年のピナツボ火山噴火を例にとり、光学的厚さの変化量をより現実的に複数層に分布させて再現実験を行い (PNTB4)、1 層に集中させる従来の方法 (PNTB1) との違いを検討した。PNTB4 では PNTB1 と比べて成層圏下部から対流圏上部にかけて気温の応答が顕著に改善されることから、火山噴火の表現方法の重要性が示唆される結果となった (図 1)。

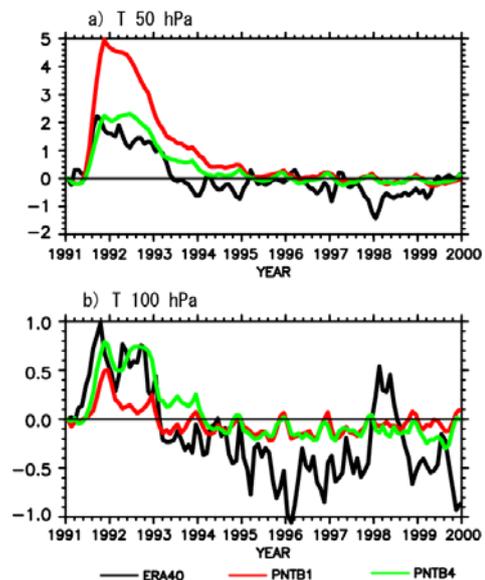


図 1 全球平均した気温偏差の時系列。赤：PNTB1 実験、緑：PNTB4 実験、黒：観測 (ERA40)。気温偏差は 1980 年代平均からの差を表す。(a) 50 hPa (b) 100 hPa。

4. 計算機資源の利用状況 (2009 年 4 月～9 月)

実行ユーザ数: 9 CPU 時間 1 ノード未満: 8 hours,
 1 ノード: 31,551 hours, 2 ノード: 4,067 hours,
 計: 35,626 hours

研究課題名：全球気候モデル MIROC の陸域過程の精緻化及びそれを用いた大気陸面相互作用の研究

課題代表者：国立環境研究所社会環境システム研究領域 花崎直太

共同研究者：国立環境研究所地球環境研究センター 伊藤昭彦

東京大学生産技術研究所 沖 大幹・鼎 信次郎・山田朋人・山崎 大・鈴木 聡

Jaecil Cho・Hyungjun Kim・Yadu Pokhrel

実施年度：平成 19 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

近年の全球気候モデル(Global Climate Model; GCM)の時空間解像度の向上と温暖化研究の高度化に伴い、陸域過程が大気過程や海洋過程に及ぼすフィードバックの重要性が増し、GCM の陸域過程の精緻化が大きな課題となっている。本研究は 1) 熱収支と水収支を中心とする陸面過程、2) 生態系変動および炭素循環のプロセスに着目し、国立環境研究所・東京大学気候システム研究センター・地球環境フロンティア研究センターで開発されてきた GCM である MIROC の陸域過程の精緻化に資することを目的とする。

2. 研究計画

本研究では MIROC の陸面過程モデル MATSIRO の改良と拡張(課題 1)および MIROC-SimCYCLE 結合モデルの開発(課題 2)を行う。

3. 進捗状況

課題 1 では MIROC と MATSIRO を使って灌漑が気候システムに及ぼす影響を数値実験する研究(課題 1A)と、氾濫を考慮できる新河川モデルの開発(課題 1B)に取り組んでいる。課題 1A は第一段階の数値実験が昨年度までに終了しており、今年度は得られた結果の頑健性を検討するための追加的・補助的な実験を行っている。課題 1B は昨年度開発した新河川モデルを利用した河川流量シミュレーションを実施するとともに、結果の検証とモデルの改良に取り組んでいる。

課題 2 では、地球温暖化の原因物質である温室効果ガスなど微量ガスの陸域交換を推定するモデル(VISIT: 旧バージョン名 Sim-CYCLE)を開発し、地域～全球スケールの評価を行っている。このモデルでは、温暖化P中核3プロジェクトの一部として、MIROC に結合して温室効果ガス収支を介した気候フィードバックを評価する研究が進行中である。このモデルはアジア地域の炭素収支評価にも適用されており、空間分解能 2 分で実行し高分解能な陸域 CO₂ 収支を推定した(日本学術振興会・日中韓フォーサイト事業の一部)。他機関で開発された 4 モデルとの相互比較や composite

データ作成を実施した(図 1)。現在は計算領域をアジア全域に拡張する作業を行っている。

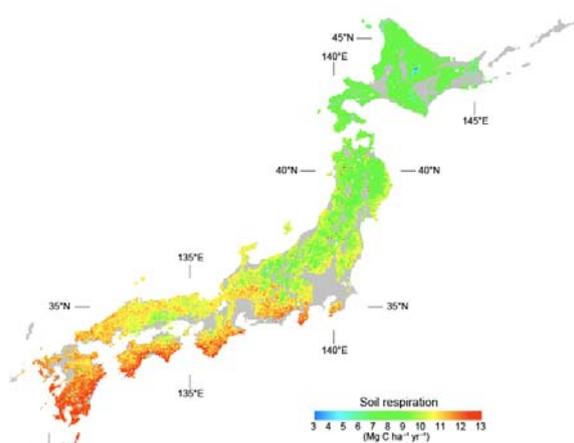


図 1 陸域モデルによって推定された日本の陸域生態系における土壌 CO₂ 放出量分布。

全球スケールのモデル実験では、CO₂だけでなくメタンおよび亜酸化窒素の陸域収支を推定し、温室効果ガス収支における時空間変動を推定した。IPCC AR4 に示された(MIROC を含む) AOGCM で予測された温暖化シナリオを用いて、off-line での影響評価および推定不確実性評価を実施中である。将来的な CO₂ 吸収量低下やメタン放出の増加が重要になる可能性を示した。

4. 今後の計画

今年度は本研究課題の最終年度である。研究成果をまとめ、出版する作業に注力する。課題 1A では数値実験の頑健性についての検討を踏まえ、灌漑が気候システムに及ぼす影響についてまとめる。課題 1B では新河川モデルの安定版の完成に努める。課題 2 では陸域生態系モデルを用いたアジア地域およびグローバルな温室効果ガス収支について論文にまとめる。

5. 計算機資源の利用状況(2009年4月～9月)

実行ユーザ数: 10 CPU 時間 1 ノード未満: 528 hours, 1 ノード: 5 hours, 2 ノード: 0 hour, 計: 533 hours

研究課題名：オゾン層破壊の長期変動要因の解析と将来予測に関する研究

課題代表者：気象研究所 環境・応用気象研究部 柴田清孝
 共同研究者：気象研究所 環境・応用気象研究部 出牛 真
 実施年度：平成 21 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

フロンガス等のオゾン層破壊物質の国際的な規制の結果として、種々の観測データの解析から成層圏オゾン減少のトレンドがストップしていたり、南極のオゾンホールが頭打ちになっていたりしている。今後の関心は、成層圏オゾンがいつごろ増加に転じ、また、南極オゾンホールがいつごろ消滅するかにある。しかし、個々の地域で成層圏オゾンがどのように推移するかは温室効果気体増加による地球温暖化が少なからぬ影響を与える。その評価のため気候モデルの温暖化実験で得られた海面水温の将来予測値や温室効果気体・オゾン層破壊物質の将来シナリオを使って、化学-気候モデルのランの国際比較がなされているが、ほとんどが単一のランであり、内部変動による不確実性の影響がなお大きく含まれている。本研究では、化学-気候モデルの複数のラン（アンサンブルラン）を行い、オゾン層の過去再現実験や将来予測実験における不確実性を減少させることを目的としている。

2. 研究計画

国際的プロジェクトの化学-気候モデル検証活動 (CCM Validation) で定められた課題のシミュレーションを行う。強制力、シナリオの与え方、積分期間等が異なる種々のシミュレーションを行う。過去再現のランには全ての強制力が含まれているが、将来予測に関連したランには太陽 11 年変動は含まれておらず、火山エアロゾルはバックグランド値、年代固定ランの境界値や強制力は当該年を挟んだ 10 年平均値である。過去再現実験 (REF-B1)、過去再現-将来予測実験 (REF-B2) について初期値が異なるアンサンブル実験を行っている。ランの内訳は以下の通である。

- ・CTL-B0 (1960 年、積分 20 年以上)、過去気候再現。
- ・REF-B0 (2000 年、積分 20 年以上)、現在気候再現。
- ・REF-B1 (1960-2006)、過去再現。
- ・REF-B2 (1960-2100)、過去再現-将来予測。
- ・SCN-B2b (1960-2100)、過去再現-将来予測、ただし、オゾン破壊物質は 1960 年固定。
- ・SCN-B2c (1960-2100)、過去再現-将来予測、ただし、温室効果気体、海面水温は 1960 年固定。

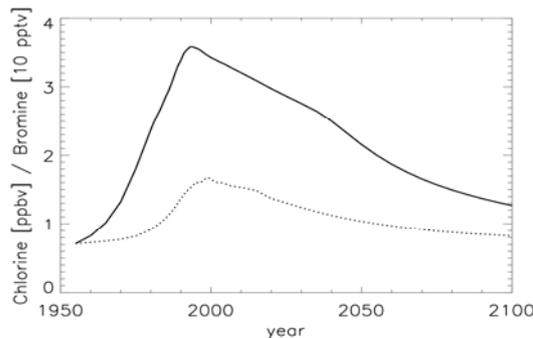


図 1 地表で与えた全塩素量(実線)と全臭素量(点線)の経年変化。

オゾンの経年変化に非常に大きな影響を与える地表でのフロン等のオゾン層破壊物質 (ODSs) の境界条件は過去の値は観測値に基づき、将来値は調整された (Adjusted) A1 シナリオに基づいて全球一様に与えた (図 1)。図から明らかなように地表の ODSs は 1950 年台から急激に増加し 1990 年代の半ばで最高値を取り、その後は緩やかに減少していく。

3. 進捗状況

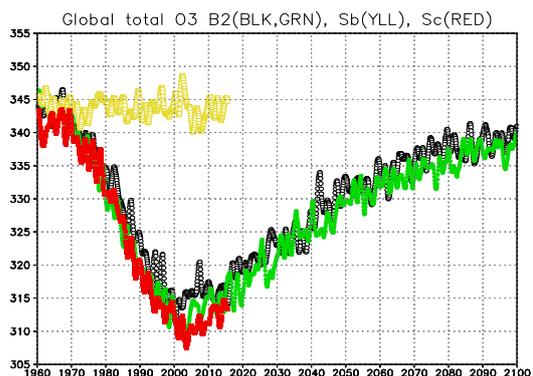


図 2 全球平均オゾン全量の経年変化。(黒、緑) REF-B2 ランの 2 メンバー；(赤) SCN-B2c、ただし 2015 年まで；(黄) SCN-B2b、ただし 2015 年まで。いずれも 12 カ月の移動平均を行っている。

今年度は複数のアンサンブル実験と感度実験としての SCN-B2b と SCN-B2c を行っている。後者の 2 つは

この原稿作成時点で得られている 2015 年までの結果である。図 2 に示すように、REF-B2 のメンバー間のオゾン全量の違いは、年々変動は勿論のこと、長期間の平均値も 4 ドブソン程度系統的に異なっており、さらに正確な評価にはさらにアンサンブルが必要なことを示している。REF-B2 の結果はオゾン層が最小になるのは 2000 年頃であることを示しており、地表の ODSs の最高値より 5 年程度遅れて成層圏に表れている。この遅れの程度はこれまでの見積もりと整合的である。

オゾン層が 1980 年の値に回復するのは 2060 年付近であり、これ以降も増加し続け、いわゆる、スーパーリカバリーが起こることを示している。これは温室効果気体の増加により対流圏の温暖化とは逆に成層圏では寒冷化が進行し続け、オゾン生成反応は温度に無関係であるが、オゾン破壊反応の反応係数の温度異存性のため、オゾンが減少することによるものである。

ODSs を 1960 年代に固定し温暖化による気候変化のみを与える SCN-B2b ランではオゾンは減少せず、また、気候を 1960 年代に固定し、ODSs は図 1 のように変化させる SCN-B2c では 2000 年頃まではほとんど REF-B2 を同じであるが、最小値の年は若干遅い。

4. 今後の計画

引き続き SCN-B2b、今 SCN-B2c のランを継続し、2100 年まで積分を行う。さらに、REF-B2 のもう 1 メンバーのランも 2100 年まで行う。その後、これらを解析・比較し、オゾン層の回復に与えるさまざまな要因を緯度帯や高度ごとに同定する。

5. 計算機資源の利用状況 (2009 年 4 月～9 月)

実行ユーザ数: 1 CPU 時間 1 ノード未満: 0 hour,
1 ノード: 31,655 hours, 2 ノード: 0 hour,
計: 31,655 hours

6. 昨年度研究課題のまとめ

6.1. 昨年度研究課題名

オゾン層破壊の長期変動要因の解析と将来予測に関する研究

6.2. 昨年度研究課題の目的

化学-気候モデルの複数のラン(アンサンブルラン)を行い、オゾン層の過去再現実験や将来予測実験における不確実性を減少させることを目的としている。

6.3. 昨年度研究課題の成果概要

単一のメンバーしかなかった REF-B2 について、南極点に近い地点(880°S)における成層圏 50 hPa での総塩素量(Cly)とオゾン全量の帯状平均値の経年変化を調べた(図 3)。緑の線の最低値(の包絡線)がオゾンホール(の経年変化)を定性的に表している。オゾン全量は 2000 年ころまで急激に減少し、その後緩やかに回復していき、Cly が 1970 年付近から急激に増加し 2000 年ころに最大値の約 3 ppb を取った後、緩やかに減少している。一方、オゾン全量も 2000 年過ぎまで急速に減少し、それから反転して徐々に増加しており、Cly と非常に良い相関を示している。一方、北極では Cly の経年変化は南極と非常に良く似ているが、オゾン全量は、南極と異なり、2000 年以前でも非常に緩やかに減少しており(図省略)、力学の関与が大きいことを示している。

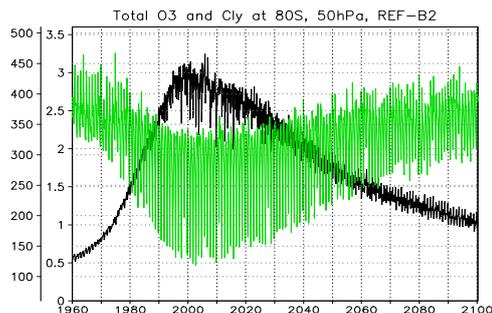


図 3 南極(80°S)におけるオゾン全量と総塩素量の経年変化(1960-2100年)。オゾン全量は緑線(目盛りは外側の縦軸、単位はドブソン(DU))、総塩素量(Cly)は黒線(目盛りは内側の縦軸、単位は ppbv)は帯状平均値である。

6.4. 昨年度計算機資源の利用状況

実行ユーザ数: 1 CPU 時間 1 ノード未満: 3 hours,
1 ノード: 54,306 hours, 2 ノード: 0 hour,
計: 54,309 hours

研究課題名：・GOSAT データ処理運用システムの開発 ・GOSAT データ処理運用システムの試験および定常運用

課題代表者：国立環境研究所地球環境研究センター 渡辺 宏
 共同研究者：国立環境研究所地球環境研究センター 横田達也・Shamil Makshutov・松永恒雄・
 開 和生・河添史絵・林 謙二・石原博成・信田浩司・太田絵美・菊地信弘・
 仁衡琢磨・小林弘幸・宮坂隆之・菊池信行・國島 和・松澤邦裕・川崎裕之・
 小島伸一・蒲生京佳・植村暢之・松田 寿
 実施年度：平成 19 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

温室効果ガス観測技術衛星(GOSAT)は平成 21 年 1 月 23 日に打ち上げられた。国立環境研究所(NIES)では、GOSAT の観測データの hoch 処理を行い、CO₂、CH₄ 濃度を算出し、それら濃度分布に基づいて、大気輸送モデルを利用して、亜大陸規模別に炭素の吸収・排出量を推定するなどの役割を担っている。

2. 研究計画

GOSAT により観測されたデータは、JAXA/EORC にて受信し、レベル 1 処理が行われた後、NIES に設置された GOSAT データ処理運用施設(GOSAT DHF)で hoch 処理を行い、レベル 2,3,4 プロダクトを作成する。データ処理には、3 つの施設の計算機 (GOSAT DHF 内に設置する計算機、NIES スーパーコンピュータ、東京大学 T2K オープンスパコン) を連携して利用する。NIES スーパーコンピュータは、レベル 2 処理の中で CO₂、CH₄ のカラム濃度算出の前処理としての大気輸送モデル計算処理及びエアロゾル輸送モデル計算処理、レベル 4 の中で炭素収支モデル計算処理、大気輸送モデル計算処理に利用される。

3. 進捗状況

現在、定常的なデータ処理を実施している。

CO₂ カラム濃度算出の前処理としての大気輸送モデル計算及びエアロゾル輸送モデル計算は観測開始から継続的に処理している。これらの結果を GOSAT のそれぞれの観測位置、時刻に対応して空間、時間的に補間してカラム濃度算出時の先験値として利用する。大気輸送モデル計算結果の例(4月26日6時)を図1に示す。8月1-31日の間に観測した FTS の短波長赤外(SWIR)バンドから求めた CO₂ カラム濃度の全球分布を図2に示す。植物の活動により北半球中緯度以北で低濃度となっている傾向が確認でき、過去の地上観測などのデータと整合している。しかし、全体として明らかに低い濃度が導出されている。また、地域的に極

端に高濃度あるいは低濃度が認められるデータが存在するなどの課題がある。今後これらの課題の原因調査、検討を進める予定である。

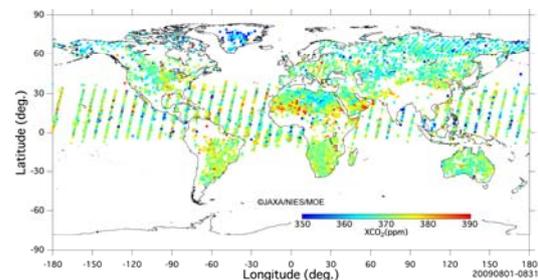


図2 SWIRバンドから求めたCO₂カラム濃度。2009年8月1-31日の観測例。

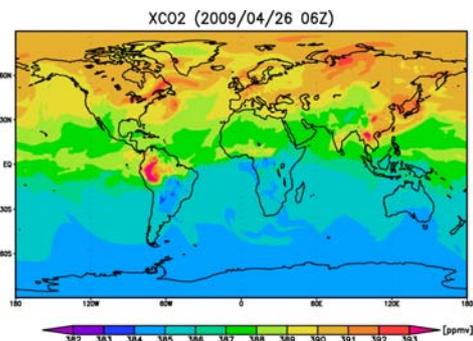


図1 大気輸送モデル計算処理結果。2009年4月26日6時の例。

4. 今後の計画

レベル 4 処理については、現在準備を進めており、来年度後半より処理を開始する予定である。

算出されたレベル 2,3 プロダクトは、プロダクトの検証作業を経たのち近々、一般ユーザへ配布予定である。また、データ処理アルゴリズムの改訂やシステムの維持・改訂を行い、プロダクトの精度向上を目指す。

5. 計算機資源の利用状況 (2009年4月～9月)

実行ユーザ数: 22 CPU 時間 1 ノード未満: 102 hours,
 1 ノード: 0 hour, 2 ノード: 0 hour, 計: 102 hours

研究課題名：大気輸送モデルとインバースモデルによる温室効果ガス収支量の推定とその高精度化に関する研究 (Application of the Transport Models for Inverse Modeling of Greenhouse Gas Fluxes)

課題代表者：国立環境研究所地球環境研究センター Shamil Maksyutov

参加研究者：国立環境研究所地球環境研究センター Dmitry Belikov・Vinu Valsala・白井知子・古山祐治・斎藤 誠・齊藤 龍・佐伯田鶴・小田知宏・高木宏志
総合地球環境学研究所 金 憲淑
東京大学気候システム研究センター 今須良一・丹羽洋介

実施年度：平成 20 年度～平成 22 年度

1. Objective

We study the global and regional distributions of CO₂ and methane surface fluxes with the ground-based, aircraft observations and satellite observation data.

2. Research plan

Our current research focuses on the use of the CO₂ and methane observations of the whole troposphere as observed by monitoring programs and GOSAT satellite. Numerical simulation of the carbon dioxide and methane is used to explain seasonal and interannual variations of the greenhouse gases and other relevant tracers along with observations by NIES monitoring programs over Siberia, East Asia, by JAL aircraft and Pacific. To provide more accurate estimation of the surface fluxes with inverse modeling, estimates of the surface fluxes, atmospheric transport model and inversion algorithms have to be improved.

3. Progress

To improve tracer transport model algorithms we implemented 2nd order scheme as well as 2nd order moments scheme for global tracer transport model. In order to resolve impact of high resolution emissions of anthropogenic origin, our coupled Lagrangian-Eulerian transport model has been adapted to using surface fluxes of 5-10 km resolution globally. Corresponding fossil fuel emission dataset was developed based on population distribution and large point source emissions. With an ocean pCO₂ data assimilation system we completed simulation of the surface ocean pCO₂ fields from 1996 to 2008, using assimilated ocean currents from GFDL and OCCO reanalyzes. The inverse modeling algorithm was tested with updated set of surface fluxes and chemical sinks. JMA GPV meteorological data at 0.5 degree resolution were tested for use in tracer transport model with several valuable tracer transport algorithms. Improved treatment of the cloud convection was developed using operational

forecast of the convective precipitation fields and vertical limits of convection. A multiyear set of the response CO₂ functions to pulse tracer emissions has been simulated for inverse modeling studies. Optimized climate drivers for VISIT model are now available for simulation of the terrestrial carbon cycle (Fig. 1).

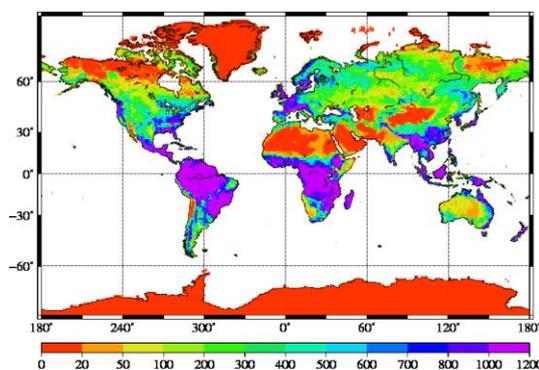


Fig. 1 Global distribution of the VISIT NPP with optimized precipitation.

4. Future plan

We started developing a dataset of mass-conserving winds suitable for realistic modeling of long-lived tracer transport in the upper troposphere and stratosphere. A global distribution of the seasonally varying regional CH₄ surface fluxes will be studied with inverse model. Correction of the transport model simulated biases with observed climatology is under development in order to improve the reference data for retrieval of GOSAT concentration from spectroscopic data. Terrestrial biospheric model VISIT will be adapted for parameter tuning to optimize a seasonal cycle simulation in global scale, and high resolution spatial fluxes are under development.

5. CPU use in the current year (from April to September 2009)

13users, CPU hours <1 node: 8,875 hours,

1 node: 254 hours, 2 node: 2,045 hours, total: 11,173 hours

研究課題名：CAI 衛星解析とモデルシミュレーションの統合システムの構築 (Development of a Combined System for CAI-Satellite Imager Analysis and Model Simulation)

課題代表者：東京大学気候システムセンター 中島映至

共同研究者：東京大学気候システムセンター Nick Schutgens・五藤大輔・鶴田治雄

宇宙航空研究開発機構 向井真木子

実施年度：平成 21 年度～平成 21 年度

1. Purpose

We want to improve global predictions of atmospheric aerosol loads by SPRINTARS (a global three-dimensional aerosol transport-radiation model, coupled to MIROC, the CCSR/NIES/FRCGC-GCM), firstly to support the GOSAT FTS retrievals, and secondly to improve our understanding of aerosol anthropogenic climate forcings.

2. Method

SPRINTARS predictions are improved in two ways: firstly by more sophisticated modeling, and secondly by assimilating observations. Sulfate modeling is improved by implementing more detailed aqueous-phase reactions. Nitrate aerosols are introduced through a thermodynamic equilibrium model for ammonium-sulfate-nitrate components. Finally, overall aerosol modeling is improved by assimilating AOT (Aerosol optical thickness) and AE (Angström exponent) observations that allow us to adjust aerosol emissions to realistic levels.

3. Results

In the previous year, we found that the AOT in SPRINTARS tends to be lower than that obtained from satellite imagers. The improvement in the sulfur module causes an increase in column SO₄ burden. The implementation of the new nitrate module also causes an increase in column aerosol burden. As a result, the newly simulated AOT is larger than that in the original SPRINTARS and closer to the satellite-observed AOT, especially over East Asia and the north Pacific (Figure 1).

In the previous year, we developed an ensemble Kalman filter for global aerosol that has now been extensively tested with AERONET, SKYNET and MODIS observations. The system uses an ensemble of SPRINTARS simulations with different emission

scenarios and observations of AOT and AE to arrive at a best estimate of global aerosol loads (see Figure 2).

4. Future plans

GOSAT CAI observations will be applied in the assimilation system. The system will be used to actually estimate new emission scenarios. In addition, we will continue to improve AOT in SPRINTARS.

5. CPU use in the current year (from April to September 2009)

4 users, CPU hours <1 node: 1,785 hours,

1 node: 26,281 hours, 2 node: 0 hour, total: 28,066 hours

6. Summary in the previous year

6.1. Project

Development of a Combined System for CAI-Satellite Imager Analysis and Model Simulation

6.2. Purpose

To improve global predictions of aerosol loads, we propose to combine simulated data from a global three-dimensional aerosol transport-radiation model (SPRINTARS) coupled to the CCSR/NIES/FRCGC-GCM (MIROC) with observed data by CAI.

6.3. Abstract

We compared simulated aerosol distributions by a global three-dimensional aerosol transport-radiation model (SPRINTARS) coupled to the CCSR/NIES/FRCGC-GCM (MIROC) with observations by AERONET and SKYNET surface networks and also by MODIS and MIDORI-II/GLI satellite-borne imagers. These comparisons show that emission inventories and radii of aerosols in SPRINTARS should be modified.

6.4. CPU use in the previous year

3 users, CPU hours <1 node: 620 hours,

1 node: 72,096 hours, 2 node: 0 hour, total: 72,716 hours

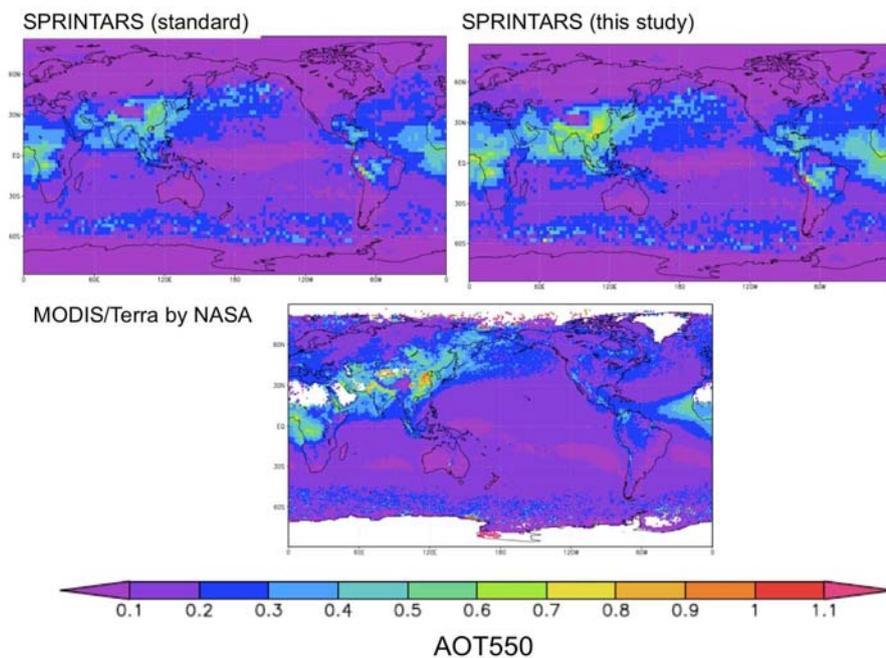


Figure 1 Annual mean AOT at 550 nm obtained by the standard SPRINTARS (upper, left), this study (upper, right), and TERRA/MODIS (lower).

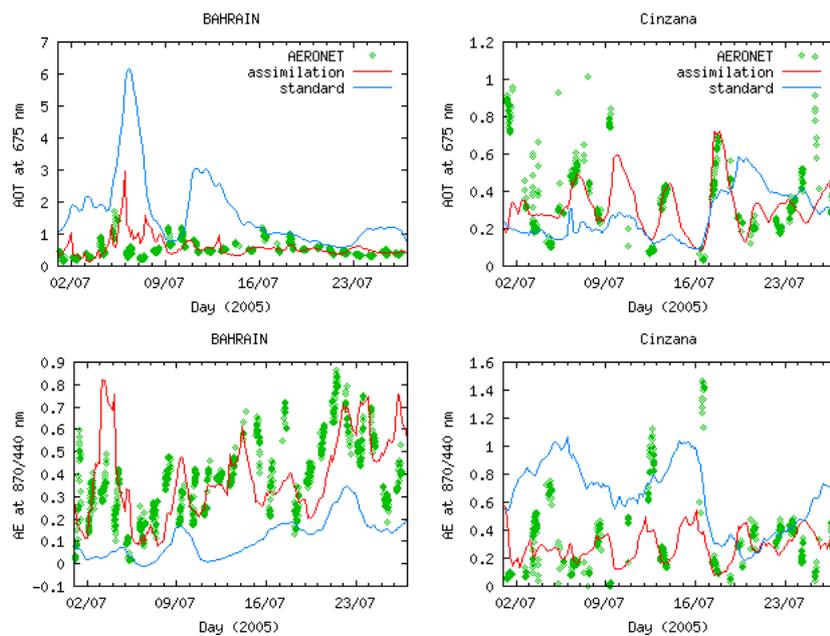


Figure 2 Effect of assimilation on SPRINTARS simulation.

研究課題名：NICAM による雲降水システムの研究

課題代表者：東京大学気候システム研究センター 佐藤正樹
 共同研究者：東京大学海洋研究所 柳瀬 亘
 実施年度：平成 21 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

全球非静力学大気モデル NICAM は、正二十面体を細かく分割する方式による全球格子モデルである。環境研 SX-8R では、全球一様の 30 km 格子シミュレーションや、ターゲット領域で～5 km 格子を実現できるストレッチ格子のシミュレーションを行うことができる。本課題では主に熱帯低気圧の発生過程について調べるため、北太平洋やインド洋の海域をターゲットとしたストレッチ格子シミュレーションを行ってきた。

熱帯低気圧はある程度の強さの渦が最初にあると、積雲対流の凝結熱や海面からの潜熱供給との相互作用により渦が自発的に発達することが知られているが、そもそもの最初の渦がどのようにしてできるかという発生過程については十分に理解がされていない。熱帯低気圧の発生には海面温度などの環境場（数千 km 以上）、熱帯波動のようなトリガーとなる擾乱（千 km～数千 km）、積雲対流の組織化（数 km～千 km）といったマルチスケールの現象が関与している。このマルチスケールの力学を調べるため、本課題では NICAM を用いている。一方で熱帯低気圧の発生のシミュレーションは初期データの依存性が大きく、発生の数値予報は 2～3 日前からでも難しい場合がある。このため、シミュレーションでは様々な初期時刻やデータセットを試す必要がある。数多くの並列計算を行える国内有数の計算機環境として、環境研 SX-8R を活用している。

2. 研究計画

熱帯低気圧の発生しやすい北太平洋西部やインド洋などをターゲット領域とし、格子間隔を 7 km にした NICAM ストレッチ格子シミュレーションを行う。各事例に対して様々な初期時刻やデータセット（気象庁や NCEP の解析データ）を試し、再現性の良い実験結果を用いて発生メカニズムに関する詳細な解析を行う。昨年度までの 2 年間は環境場とトリガー擾乱に関する研究を行った。本年度は積雲対流の組織化について調べるため、集中観測でとらえられた 2008 年の台風 Fengshen の再現実験を行なった。台風 Fengshen は 2008 年 6 月 19 日に発生し、フィリピンで 700 人以上の犠牲者を出すフェリー沈没事故を引き起こした。

3. 進捗状況

初期値には台風 Fengshen 発生の 2～5 日前の気象庁・NCEP・ECMWF の大気解析データを試した。初期時刻が早い方がより早い段階の台風発生のプロセスを調べられる一方で、再現は難しくなる傾向にあるため、両者の兼ね合いで最も良い結果の得られた 6 月 15 日 00UTC（台風発生の 3 日前）の NCEP データを初期値に用いた実験を解析した。この実験では台風の発生位置とタイミング、及びその後の経路が比較的良く再現された（図略）。

図 1 はシミュレーションでの台風が発生する前と後の時刻で、雲分布と循環の違いを比較している。台風発生前には広い範囲に対流雲が分布しており（図 1a）、接線風の構造は弱く大きい（図 1c）。台風発生後には台風中心付近に対流雲が組織化しており（図 1b）、接線風は半径 50 km 付近の下層に強いピークが現れている。このような構造の変化に伴い、渦の強化メカニズムの違いも見られた（図略）。

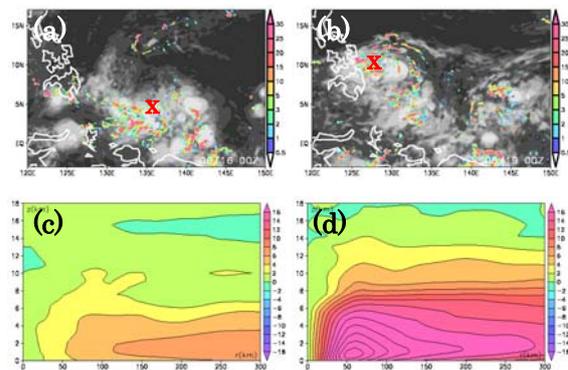


図 1 (a),(b)雲（グレー）と降水（カラー）の分布。×印は擾乱の中心位置。(c),(d)接線方向の風の動径高度分布。擾乱中心を原点とした円筒座標系にて、軸対称成分（接線方向への平均）を求めた。(a)(c)は台風発生前（16 日 00UTC）、(b)(d)は台風発生後（19 日 00UTC）。

4. 今後の計画

台風 Fengshen の発生過程における積雲対流の組織化が、どのように渦の強化と結びついているのかという詳細なメカニズムを調べていく。また、集中観測で

得られた降水や風の分布とも比較し、シミュレーションの妥当性を評価していく。

5. 計算機資源の利用状況 (2009 年 4 月～9 月)

実行ユーザ数: 2 CPU 時間 1 ノード未満: 2 hours,
1 ノード: 349 hours, 2 ノード: 6,685 hours,
合計: 7,036 hours

6. 昨年度研究課題のまとめ

6.1. 昨年度研究課題名

NICAM による雲降水システムの研究

6.2. 昨年度研究課題の目的

昨年度までも熱帯低気圧の発生過程のシミュレーションを行ってきた。本年度課題では熱帯低気圧発生における積雲対流の組織化という内部スケールについて調べているが、昨年度までは環境場とトリガー擾乱について調べた。環境場に関しては、ベンガル湾サイクロン Nargis の予測可能性と季節内振動による環境場変調との関係を、トリガー擾乱に関しては、2006 年の台風 Durian と熱帯波動との関係を調べた。昨年度は研究報告の段階では台風 Fengshen を調べる計画であったが、社会的影響の大きいサイクロン Nargis の研究が緊急課題となったため、計画を変更して台風 Fengshen を本年度に調べることにした。

また、熱帯低気圧の研究のほか、全球一様の理想化した放射対流平衡実験により、雲微物理過程と積雲対流の性質を統計的に調べる研究も行っている。

6.3. 昨年度研究課題の成果概要

2008 年 4 月にベンガル湾に発生したサイクロン Nargis はミャンマーに上陸して 10 万人を超える犠牲者を出す被害となった。ベンガル湾でサイクロンが 4 月に発生するのは比較的早く、過去 25 年で 4 事例しかない。Nargis の発生前後では大きなスケールの西風域が赤道から 10°N に移動するという環境場の変化が見られた (図 2 右)。この西風の変化はモンスーンの季節進行が季節内振動の影響で例年より早く起きたものと見られるが、この環境場の変化がサイクロンを 4 月に発生しやすくしたものと考えられる。そこで、ベンガル湾をターゲット領域とした NICAM のストレッチ格子シミュレーションを行ない、2008 年 4 月～5 月の 1 日ごとの初期値を用いて、2008 年 4 月末にサイクロン発生しやすい傾向が再現できるかどうかを調べた。

図 2 左にサイクロン発生再現性に関するシミュレーションの結果を示す (赤い線と丸)。シミュレーションでは 2008 年の 4 月末にサイクロンが発生しやすいことを再現できている。一方で、Nargis の発生場所や 1～2 日の時間スケールでのタイミングは現実とずれがあった (図略)。以上の結果から、環境場の変化は熱帯低気圧の詳細な発生位置・タイミングを決定するには不十分であるものの、発生する可能性が高い期間を予報するのに重要な情報であることが確かめられた。

本研究では Nargis 以外にも、過去にベンガル湾で発生したサイクロンに関して同様のシミュレーションを行い、上記の結論をサポートする結果を得た。

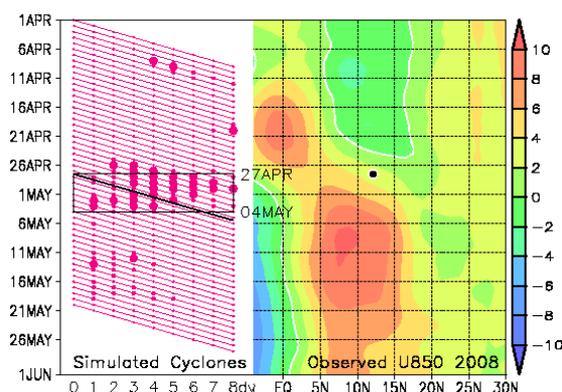


図 2 サイクロン Nargis 発生再現性 (左) と環境場の下層西風の変化 (右)。図の左半分は 50 本の赤線は、4 月 1 日～5 月 20 日の 12UTC を初期時刻とした 50 本のシミュレーション結果を示している。縦軸は 4 月 1 日～6 月 1 日までの時間、横軸は予報時間である。赤い丸はベンガル湾に 990 hPa 以下の強い低気圧が形成された時間を示している。4 月 27 日～5 月 4 日の黒い枠は実際に Nargis がベンガル湾に存在した期間である。4 月 27 日より前の初期時刻から開始したシミュレーション (黒い斜め線より上) では、サイクロンが無い状態を初期値としている。図の右半分 JCDAS 再解析データで見られた実際の環境場 (80°～100°で平均) の 850 hPa 面西風の緯度時間分布。黒丸は実際に Nargis の発生した時刻と緯度。

6.4. 昨年度計算機資源の利用状況

実行ユーザ数: 2 CPU 時間 1 ノード未満: 145 hours,
1 ノード: 9,959 hours, 2 ノード: 64,398 hours,
計: 74,503 hours

研究課題名：雲解像モデルを用いた豪雨システムと台風の高解像度シミュレーション

課題代表者：名古屋大学地球水循環研究センター 坪木和久
 共同研究者：名古屋大学地球水循環研究センター 篠田太郎・大東忠保・加藤雅也・吉岡真由美
 前島康光・日置智仁・岡本宏樹
 実施年度：平成 21 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

名古屋大学地球水循環研究センターでは、雲・降水システムとそれに伴う激しい気象の研究を、雲解像モデルを用いて進めている。本研究課題では、雲・降水現象のシミュレーションのために開発された雲解像モデル CReSS を用い、台風や局地豪雨、豪雪などの高解像度シミュレーションを行い、これらの構造やプロセスおよびメカニズムを明らかにする。

2. 研究計画

平成 21 年度は台風 0712 の中心構造形成についてのより詳細な調査、および、2009 年 1 月の北陸の降雪の 2 事例について、雲を解像する高解像度シミュレーションを行い、これらの量的評価および構造・成因を明らかにする。

3. 進捗状況

3.1. 北陸西部沿岸の停滞性線状降雪帯

冬季の北陸地方西部沿岸では、しばしば西南西から東北東方向に伸びる線状降雪(降水)帯が停滞する事例が観測される。このような降雪帯は、寒気吹き出し時に発生し、同じ位置に長い時間停滞し、海岸近くで降水の強化がみられることが特徴であり、しばしば海岸部で大雪をもたらすことがある。本研究では、2009 年 1 月 24 日～26 日に発生した事例について、数値実験を行い停滞性線状降雪帯の形成要因を調べた。

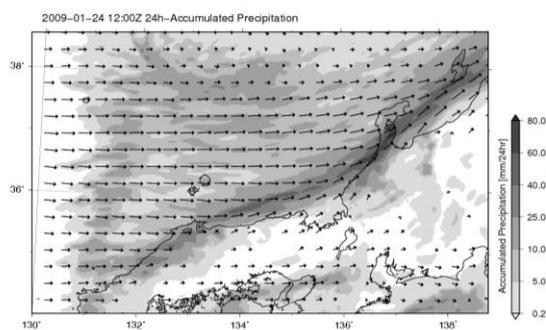


図1 CReSS計算結果24日12UTC～25日12UTC。陰影：24時間積算降水量。矢印：高度500 mの24時間平均風。

コントロールランの結果は、気象庁レーダーの観測値と比較して、降水量、停滞位置ともによく再現していた(図 1)。また、再現された線状降水帯は、環境場の西寄り風と、陸側の南寄り風との収束の場となって

いた。降水の成因と停滞について詳細に調べるために、地形と海陸分布の影響を取り除いた感度実験を行ったところ、陸側の南寄り風形成要因は、地形による効果より、地表の粗度及び熱容量等の海陸コントラストによる効果の方が大きいことが示された。

3.2. 台風 0712 号中心気圧低下に伴う変化

台風は発達するに伴い中心付近の気圧が低下する。発達に伴い、中心部の空気が何らかの形で台風の外側へ取り除かれると考えられるが、この中心部の空気がどのように取り除かれるのかは明らかになっていない。本研究では昨年度実施した台風 0712 号を引き続き対象に、中心付近の気圧低下に伴う空気塊の動きを、流跡線解析を用いて調べた。

図 2 に示したように、高度 10 km では空気塊は下降しながら外側へと移動していた。一方、高度 10 km 以下では高度を一定に保ちながら外側へと移動していた。どの高度においても、空気塊は眼の壁雲域に入り、上昇流によって対流圏上層まで運ばれていた。気塊は高度 12 km から 16 km において外側へ吹き出していた。これらのことから、中心部の空気塊は眼の壁雲域の流れによって対流圏上層に運ばれ、上層で外側へ排出されていると考えられる。

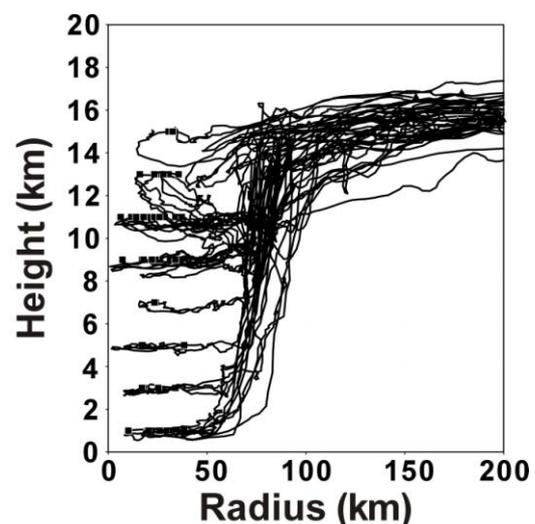


図2 前方流跡線解析の結果。実線は個々の軌跡、■が出发点、▲が到達地点を示す。

4. 今後の計画

今後は、2009 年冬の事例について感度実験をすすめさらにシミュレーションを行う。また、台風については高解像度での構造解析を進める。

5. 計算機資源の利用状況 (2009 年 4 月～9 月)

実行ユーザ数: 8 CPU 時間 1 ノード未満: 3 hours,
1 ノード: 0 hour, 2 ノード: 3,843 hours, 計: 3,845 hours

6. 昨年度研究課題のまとめ

6.1. 昨年度研究課題名

雲解像モデルを用いた豪雨と暴風の数值シミュレーション

6.2. 昨年度研究課題の成果概要

平成 20 年度は台風 0712 号、福井豪雨、日本海の小低気圧の 3 事例について、雲を解像する高解像度シミュレーションを行い、これらの量的評価および構造を明らかにした。

6.3. 2004 年の福井豪雨

福井豪雨は 2004 年 7 月 18 日未明から昼頃にかけて、福井県嶺北地方を中心に発生した局地豪雨である。この豪雨について、これまでに数值モデルを用いた研究があるが、降水の発生時刻、持続時間、降水量などについて十分再現されておらず、降水システムの発生・発達については未解明な点が多かった。本研究の CReSS を用いた水平解像度解像度 1 km の数值実験では、福井県沖から愛知県まで伸びる降水域の形状・分布や、3 時間積算雨量 100 mm を越える降水域が福井市一帯に分布している点が観測と比較してよく再現できた(図 3)。福井一帯における降水の発生過程での暖湿な空気塊の立体的な時間変化、豪雨につながった対流不安定な状況の持続が明らかになった。

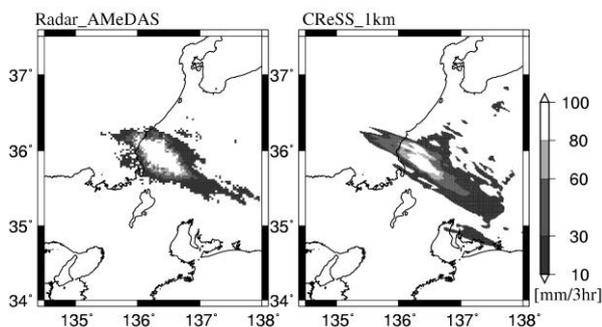


図3 (左)Radar-AMeDAS、(右)CReSSによる17日 2300～18日0100UTCの3時間積算雨量。

6.4. 豪雪をもたらす日本海上の小低気圧

日本付近で冬型の気圧配置が強まると朝鮮半島の付け根から北陸地方にかけて、帯状収束雲と呼ばれる幅の広い雲が形成され、これに沿って直径 50 km 程度の

メソ擾乱が発生することがある。本研究では 2005 年 1 月 31 日に日本海西部で発生したメソスケールの擾乱の事例について、擾乱の発生発達過程や 3 次元構造を調べた。その結果、高渦度の領域、位相速度ともに衛星画像で観測されたメソ擾乱と整合的な値が再現された。擾乱の発達要因を調べるためにエネルギー収支を計算したところ、帯状平均場の運動エネルギーから擾乱の運動エネルギーへの変換が卓越していた。したがって、擾乱の主な発達要因は順圧不安定であると考えられる。

6.5. 台風 0712 号暖気核の形成

台風を中心に、暖気核や眼の壁雲があるという構造はよく知られているが、この暖気核の形成については不明瞭な点も多い。本研究では 24 時間で中心気圧が 40 hPa 低下した台風 0712 号を対象に数值実験を行い、流跡線解析を用いて暖気核の形成プロセスを調べた。シミュレーション結果では、計算開始 24 時間後には高度 15 km 付近に温位偏差の極大が存在していた(図 4)。後方流跡線解析の結果、この温位偏差の極大は対流圏下層で吹き込み眼の壁雲域で上昇した空気と、対流圏界面付近から下降してきた空気とで形成されていることが分かった。軌跡の数は下層起源のものの方が多かった。対流圏下層で吹き込んだ空気塊が眼の壁雲域で上昇する際に非断熱加熱が起きており、この空気塊が中心付近へ吹き込むことで暖気核の形成に寄与していると考えられる。

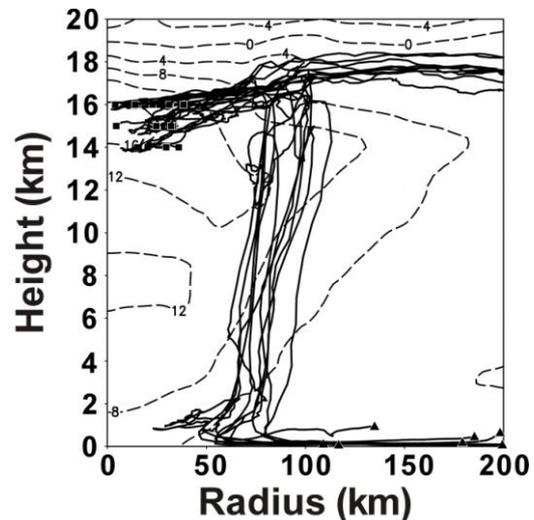


図 4 後方流跡線解析の結果。実線は個々の軌跡、破線で示した等値線は 24 時間における方位角平均した温位偏差。■が出発地点、▲が到達地点を示す。

6.6. 昨年度計算機資源の利用状況

実行ユーザ数: 9 CPU 時間 1 ノード未満: 994 hours,
1 ノード: 13,253 hours, 2 ノード: 49,510 hours,
計: 63,758 hours

研究課題名：湿潤惑星大気用数値モデル群の開発および基礎的実験

課題代表者：神戸大学大学院 理学研究科 林 祥介

共同研究者：北海道大学大学院 理学研究院 石渡正樹・小高正嗣・山下達也

九州大学大学院 理学研究院 中島健介

神戸大学大学院 理学研究科 高橋芳幸・納多哲史

情報通信研究機構 電磁波計測研究センター 森川靖大

実施年度：平成 21 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

本研究の目的は、惑星大気も含めた湿潤大気の多様性の考察に適した数値モデル群の整備と、それを用いた基礎的数値実験の実行である。数値モデル群としては、全球大気モデルと対流モデルを中心に、さまざまな階層の気象学・地球流体力学モデルを一連のセットとして用意することを目指している。統一した入出力インターフェースと共通したコード書式を用いることによって、モデルの可読性を高め、モデル間の相互参照やモデルの変更が容易にできるようにする。モデルの改変を容易にすることを目的とした開発例としては、米国 GFDL の気候モデルの枠組である FMS があるが、ここでは、種々の階層の概念的モデルの延長上に全球モデルや対流モデルを位置づけ、地球流体力学的な考察に踏み込むための基盤としてのソフトウェアの構造を検討し、実装する。

基礎的数値実験としては、これらのソフトウェアを用いて、現在の地球的な設定を中心に火星や系外惑星的な設定をも含む湿潤惑星大気の循環構造のパラメータ依存性実験を行う。地球とは異なる条件も含めた多様な実験を行い、地球大気に関して得られてきた知見をテストし、あるいは、より広範なパラメータ空間への応用可能性を担保することを目指す。

2. 研究計画

数値モデル群の整備に関しては、これまでに我々が開発を行ってきた地球型惑星大気大循環モデル DCPAM および非静力学対流モデル deepconv においてモデルインターフェース、プログラム構造、ソースコードの書式の統一化を行う再構成を継続する。昨年度は DCPAM の再構成を実施したので、今年度は同じ設計方針で deepconv を再構成する。更に、同じ枠組みで軸対称 2 次元モデルの開発を行う。

DCPAM を用いた実装実験としては、地球と火星を覆うパラメータ（自転角速度・半径・重力定数・大気成分・太陽放射など）での数値計算実行能力の確保をめざす。地球的な条件で数値計算を行うために、地表

面プロセスのモジュールの整備を行い、それらを用いた予備的実験を実施する。また、昨年度に開始した同期回転惑星設定の数値実験を拡張し自転角速度に対する依存性を調査する。同期回転惑星とは公転周期と自転周期が等しい惑星であり、永続的な昼半球と夜半球を持つ。この調査により、海洋(液体の水)が存在する地球的な環境が実現される条件をパラメータの広範囲にわたって考察するための基礎的なデータを蓄積する。

deepconv を用いた実装実験としては、火星大気を想定した CO₂ を主成分とする大気中の対流に関する数値実験を行う。主成分が凝結する場合、湿潤対流が発生するためには高い過飽和度をもつ状態が生じる必要がある (Colaprete et al., 2003)。ここでは、過飽和状態も考慮した主成分凝結対流の数値実験を行い、湿潤対流の多様性に関する基礎知識を蓄積する。

3. 進捗状況

モデル整備に関しては、現在 deepconv の再構成作業を進めている段階にあり、今年度中に再構成作業を終了する予定である。DCPAM については、軸対称 2 次元モデルの開発に向けて、軸対称設定で使用する微分演算モジュールを開発した。また、地球条件および火星条件における数値実験を行うために必要となる地表面過程のモジュールの整備を行った。火星条件における数値実験の実行ならびに大気質量や大気組成を変更しての計算は今後実施する予定である。

DCPAM の実装実験として、同期回転惑星条件において自転角速度を地球の 2/3 倍にした計算を行った。昨年度は地球の自転角速度を与えた場合についての計算を行い、昼半球から夜半球への熱輸送は南北対称的に起こるという結果を得ていた。これに対して、自転角速度を 2/3 倍にした実験では、強い南北非対称性を示す結果が得られた(図 1)。今後も、南北非対称状態が得られる条件を特定するために自転角速度を変えたパラメータ実験を行うとともに、南北非対称性をもたらす力学過程を明らかにする解析を続行する予定である。

deepconv を用いた実装実験として、CO₂のみからなる大気中の対流に関する数値実験を行った。凝結が起り始める過飽和度を 1.35 とした場合とした場合について 40 日の積分を行った結果、ほぼ全領域に雲が広がる準平衡状態が得られた(図 2)。一方、過飽和を許容しないとした実験では、雲が全て消失した(図は示さない)。以上の結果は、主成分が凝結する大気では、許容される過飽和度に応じて雲分布および循環構造が大きく変わる可能性があることが示唆している。

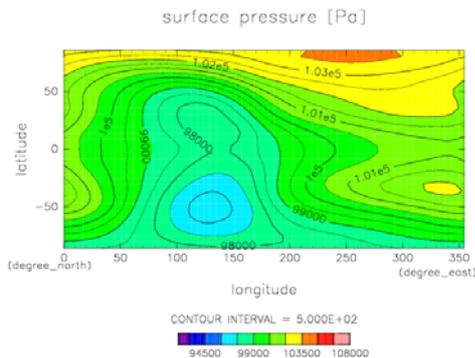


図 1 同期回転惑星設定で得られた表面気圧分布 [hPa]。丸自転角速度として地球の 2/3 倍の値を与えた場合。1000 日から 2000 日の時間平均を示す。

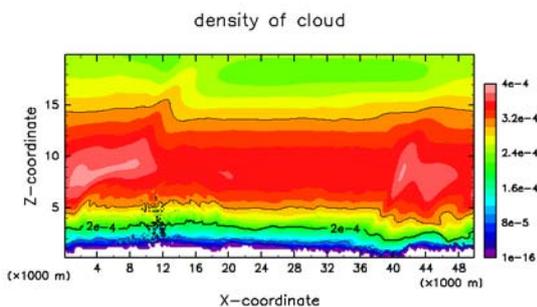


図 2 主成分凝結する大気における対流の計算結果。40 日積分における最後の氷雲密度分布を示す。

4. 今後の計画

湿潤惑星大気の循環構造に関する広汎なパラメータ依存性の調査を行うために、自転角速度、惑星半径、太陽定数などを変化させたパラメータ変化実験の実施を予定している。地球的な条件、火星的な条件、同期回転惑星条件をカバーするパラメータ空間における湿潤大気の熱構造と循環構造の多様性を掌握するべく、その計算可能性を探索する。加えて、DCPAM と deepconv の両モデルを用いて数値計算を実行し、全球スケールから雲対流スケールに至る比較考察を試みる。その対象としては、主成分凝結大気あるいは暴走温室状態 (Ishiwatari et al., 2002) などの、凝結性成分が多量に存在する湿潤大気を予定している。

5. 計算機資源の利用状況 (2009 年 4 月～9 月)

実行ユーザー数: 8 CPU 時間 1 ノード未満: 600 hours, 1 ノード: 0 hour, 2 ノード: 0 hour, 計: 600 hours

6. 昨年度研究課題のまとめ

6.1. 昨年度研究課題名

湿潤惑星大気用数値モデル群の開発および基礎的実験

6.2. 昨年度研究課題の目的

「1. 研究目的」で述べた、多様な湿潤大気の考察に適した数値モデル群の整備・基礎的数値実験の実行を目指して、これまでの林および中島の 2 課題においてそれぞれ開発されてきた全球モデルと対流モデルをモデル群の中心に据えたモデル群の整備を開始する。モデル整備としては、両モデルのモデルインターフェース、プログラム構造、ソースコードの書式の統一化を行うための再設計および再構成を行う。

数値モデル群の実装実験としては、現在の地球的な設定、火星や系外惑星的な設定をも含む湿潤惑星大気の循環構造のパラメータ依存性実験に進むための実験を開始する。地球とは異なる火星あるいは系外惑星的な状況における数値計算から開始し、湿潤対流の多様性に関する知識を蓄積する。

6.3. 昨年度研究課題の成果概要

DCPAM と deepconv においてプログラム構造の統一化を進めるために、入出力インターフェースの改良とメインプログラム構造の設計を見直した。入出力インターフェースに関しては、簡素な入出力インターフェースを持つ階層的数値モデル群のための Fortran 90/95 ライブラリ gtool5 を開発し、公開した (<http://dennou-k.gfd-dennou.org/library/gtool/gtool5.htm>)。DCPAM と deepconv のプログラム構造に関しては、gtool5 を活用した形で構造と書式をそろえるべく両モデルの再設計をおこなった。その設計方針に基づき、DCPAM の再構成を行った。

DCPAM の実装実験としては、同期回転惑星の数値計算を開始した。地球と同じ自転角速度をもつ同期回転惑星では、赤道域においては赤道波に、中緯度域においては傾圧不安定擾乱に伴う東西熱輸送が起こることが示された。

6.4. 昨年度計算機資源の利用状況

実行ユーザー数: 6 CPU 時間 1 ノード未満: 346 hours, 1 ノード: 0 hour, 2 ノード: 0 hour, 計: 346 hours

研究課題名: 海洋中の熱塩循環の渦拡散係数の乱流シミュレーションによる予測とモデル化

課題代表者: 京都大学大学院工学研究科 花崎秀史
 共同研究者: 京都大学大学院工学研究科 岡村 徹
 実施年度: 平成 21 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

熱塩循環を計算する多くの海洋モデルにおいて、熱と塩分に等しい渦拡散係数が用いられてきた。しかし、熱と塩分の分子拡散係数には 100 倍の差があるため、乱流拡散係数とその影響が指摘されている。本研究では、熱と塩分の分子拡散に起因する渦拡散係数の違いを、数値計算に室内実験と理論を併用して解明する。同時に、熱塩二重拡散系における乱流モデルの改良を行う。

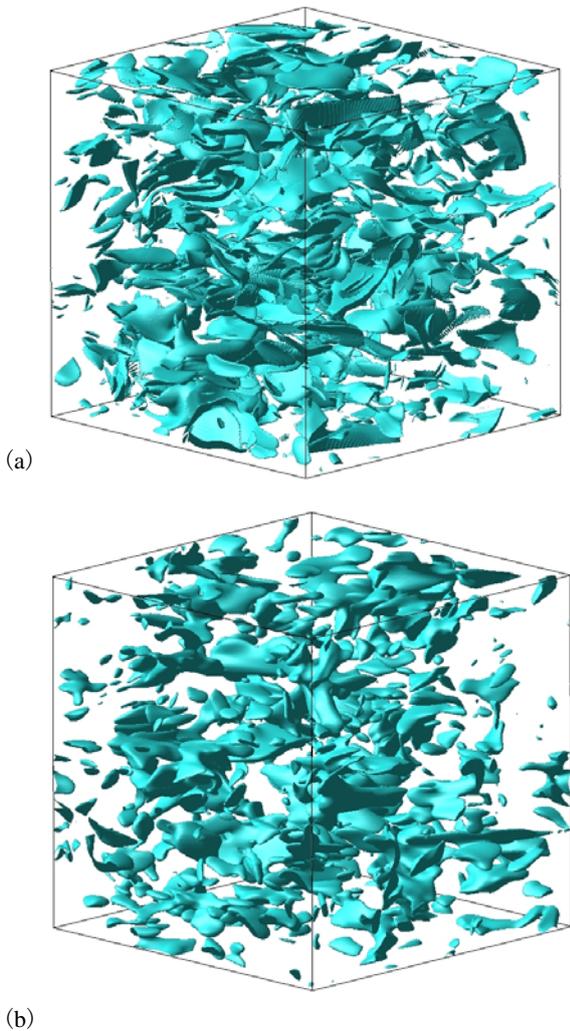


図 1 高プラントル数 $Pr=6$ のスカラー (塩分に相当) の拡散率の空間分布の成層強度依存性。(a) $Fr=2.0$ (弱成層)、(b) $Fr=0.1$ (強成層)。

2. 研究計画

今年度は、熱塩拡散構造やフラックスの

- (1) 成層強度(フルード数)依存性、
- (2) プラントル数依存性
- (3) 乱流強度 (レイノルズ数) 依存性
- (4) 初期条件依存性

などのパラメータ依存性の解析を行う。

3. 進捗状況

研究計画の (1) について、まず、成層強度 (フルード数) 依存性の解析を行った。図 1 に、 $Fr=2.0$ (弱成層) と $Fr=0.1$ (強成層) の時の高プラントル数スカラー (塩分) の拡散率の空間分布を示す。強成層の場合、弱成層の場合に比べ、構造のスケールが大きい (分厚い)。

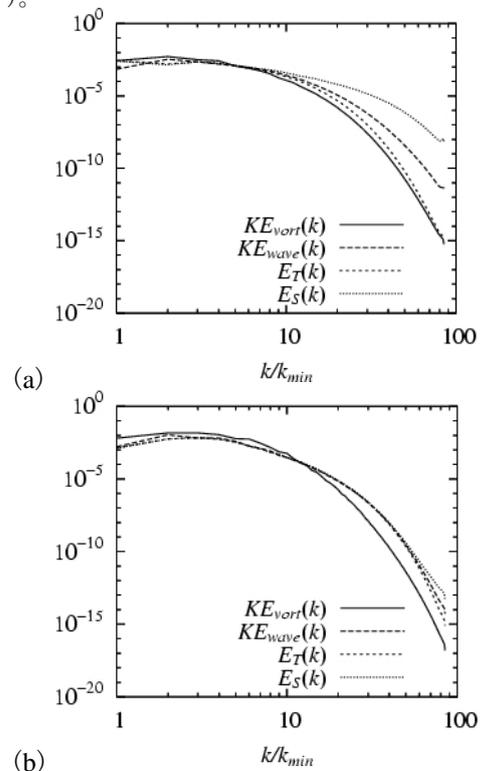


図 2 スペクトルの成層強度依存性。(a) $Fr=2.0$ (弱成層)、(b) $Fr=0.1$ (強成層)。 KE_{vort} : 運動エネルギーの渦成分、 KE_{wave} : 運動エネルギーの波動成分、 E_T : $Pr=1$ のスカラー、 E_S : $Pr=6$ のスカラー (位置エネルギー) のスペクトル。

図 2 に、対応するエネルギースペクトルを示す。強成層の場合、弱成層の場合に比べ、 E_S 及び KE_{wave} の高波数成分が小さい。これは、強成層時には、高波数領域にまで成層効果が働いて非線形効果が弱まり、エネルギーカスケードが抑制されるためと考えられる。なお、高波数領域において、位置エネルギー E_S ~ 運動エネルギーの波動成分 KE_{wave} が成立しているのは、両者の間にエネルギー等分配が成立しているためと考えられる。

4. 今後の計画

今後、物質フラックス（渦拡散係数）の成層強度、プラントル数、乱流強度、初期条件依存性を進め、渦拡散モデルの改良につなげていく。

5. 計算機資源の利用状況（2009 年 4 月～9 月）

実行ユーザ数: 2 CPU 時間 1 ノード未満: 0 hour,
1 ノード: 452 hours, 2 ノード: 0 hour, 計: 452 hours

6. 昨年度研究課題のまとめ

6.1. 昨年度研究課題名

海洋中の熱塩循環の渦拡散係数の乱流シミュレーションによる予測とモデル化

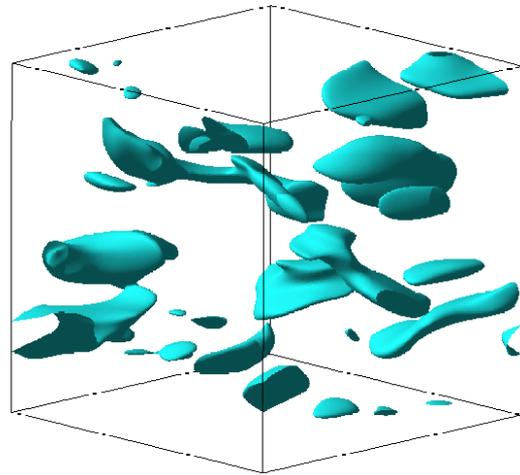
6.2. 昨年度研究課題の目的

渦拡散係数の挙動を決定する要素を解析する。特に、前年度に開発した「波動-渦分解」プログラムを用いて、運動エネルギーの「波動-渦分解」による解析を行う。

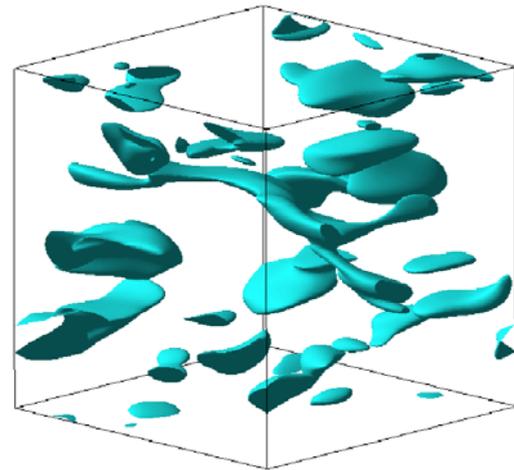
6.3. 昨年度研究課題の成果概要

Batchelor スケールと呼ばれる、熱や塩分などの物質が拡散する小スケールに至る熱・塩分の分布構造を解析した。その結果、波動成分はエネルギーの順カスケードを行うのに対し、渦成分は逆カスケードを行うため、小スケールでは波動成分が支配的となり、大スケールでは渦成分が支配的となることがわかった。

また、共存する 2 種類のスカラーの密度成層への寄与の比率が流れ場に与える影響を調べた結果、図 3 に示すように、塩分のような高プラントル数物質の成層への寄与率が 50% 程度以上になると、物質分布構造は、寄与率が 100% の時と類似してくることがわかった。実際の海洋では、寄与率は概ね 50% 程度であり、分布構造の場所依存性は弱いことを示している。スカラー組成比が散逸構造にあまり影響しないことは、モデル化において緯度等の地域性をあまり考慮する必要がないことを示唆している。



(a)



(b)

図 3 高プラントル数物質の散逸率の空間分布。高プラントル数物質の密度成層への寄与の比率がそれぞれ、(a) 50%、(b) 100% の時。両者の構造に大きな差は見られない。

6.4. 昨年度計算機資源の利用状況

実行ユーザ数: 2 CPU 時間 1 ノード未満: 122 hours,
1 ノード: 10,669 hours, 2 ノード: 0 hour,
計: 10,792 hours

研究課題名：MIROC 中解像度版および氷床力学モデルと炭素循環モデルを用いた古気候数値実験と温暖化予測

課題代表者：東京大学気候システム研究センター 阿部彩子
 共同研究者：東京大学気候システム研究センター 岡 顕・吉森正和・倉橋貴純・末吉哲雄
 北澤達哉・小山佑介
 実施年度：平成 21 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

本研究では、MIROC 気候モデルに氷床モデルおよび炭素循環モデル（海洋の生物化学過程を組み込んだ海洋炭素循環モデル、陸域の LPJ 動的植生炭素循環モデル）を併用できるように、必要な結合作業やモデル開発を行う。それらのモデルを利用し、最終氷期などの古気候実験を行い、大気水循環、熱塩循環、海洋炭素循環、陸域炭素循環、植生、氷床、海洋トレーサー、ダストなどの変化特性を調べる。またフィードバック解析などの解析を行って変動特性を明らかにしていく。

2. 研究計画

海洋熱塩循環および海洋炭素循環については、MIROC による最終氷期再現実験をベースとし、その結果をより詳細に調べるための数値シミュレーションを実施する。具体的には、(a) 海洋大循環モデルによる最終氷期における海洋深層循環のシミュレーション、(b) 氷期における海洋生物生産の変化や大気中二酸化炭素濃度変化について議論するための海洋炭素循環シミュレーション、(c) モデル実験結果を古気候データと比較検討するための古海洋指標のシミュレーション、を行う。

3. 進捗状況

(a) MIROC モデルによる氷期再現実験では、現在に比べ大西洋深層循環が強化してしまう場合（以下、MIROC-caseA）に加えて、モデルパラメータの変更や南大洋での warm bias の修正を施すことで、氷期の大西洋深層循環の弱화를再現することに成功した結果（以下、MIROC-caseB）も得られている。両者の結果を比較することで、氷期における大西洋深層循環の弱化を再現するために必要なプロセスがどのようなものであるかを調べた。昨年度と同様に、それぞれのケースについて、「熱フラックス」「水フラックス」変化の影響を分離して調べるための海洋大循環モデルによる感度実験を実施した。また、氷期における氷床の拡大や海水準の低下に伴う海陸分布の違いの影響を分離するための実験も行った。図 1 に、MIROC-caseB の結果

を用いた場合の結果を示す。熱フラックスと水フラックスは相反する効果を持つことがわかる。MIROC-caseA の場合にも、同様な傾向が再現されていたが、それらの効果の量的な違いにより、氷期条件において循環が強化するか弱化するかが決まることがわかった。

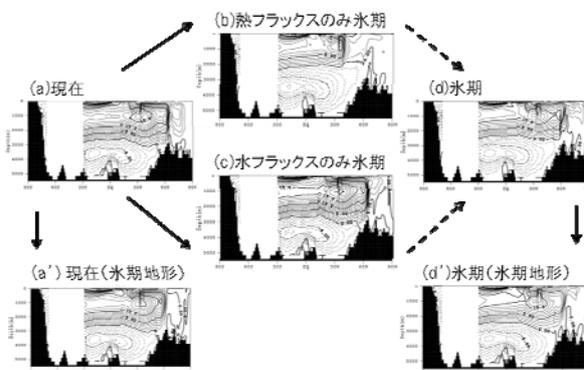


図 1 大西洋子午面流線関数[Sv]。MIROC による現在および氷期再現実験の結果から、「海面熱フラックス」「海面水フラックス」の計算に必要な変数を出し、海洋大循環モデルを駆動した結果。(a) 現在、(d) 氷期条件での結果のほか、(b) 熱フラックス、(c) 水フラックス境界条件のみ氷期条件に変更した実験の結果、および海陸分布を氷期条件に変更した実験 (a', d') の結果を示している。

(b) 氷期における大気中二酸化炭素濃度は、間氷期に比べ 100 ppm 程度低かったことが知られている。その低下を説明するためのメカニズムとして、氷期にはダスト降下量が顕著に増加しており、そこに含まれる鉄分が海洋の生物生産を増加させたという説がある。そのような効果を含め、氷期の海洋生物生産がどのようなプロセスによりどの程度変化するかを定量的に評価するための海洋炭素循環シミュレーションを行なった。その結果、「ダスト降下量の変化」が太平洋や南大洋での生物生産を増加させる一方、「循環場の変化」や「海水分布の拡大」により、高緯度域では生物生産が減少することなどがわかった。

(c)氷期における循環場を間接的に記録する古気候指標として、炭素同位体比のデータをはじめ、近年では $^{230}\text{Th}/^{231}\text{Pa}$ 比や、Nd 同位体比が用いられ始めている。古海洋データとモデル結果を直接比較検討するため、それらの古気候指標を数値シミュレーションにより再現するためのモデリング手法の開発に取り組んだ。Nd 同位体比については、希土類元素の海洋中の分布を支配するプロセスを調べる基礎的な研究をベースにその開発を進めているところである。

4. 今後の計画

氷期気候における熱フラックス変化、水フラックス変化に対する海洋深層循環の応答の違いがどのようなプロセスにより決定されているかを調べるための解析や追加実験を進めていく予定である。そのほかにも、海洋深層循環変化が大気二酸化炭素濃度に与える影響の評価、氷期海洋炭素循環における海洋深層循環の役割の評価、海洋深層循環の古気候指標となる Nd 同位体比のシミュレーション手法の確立、陸域炭素循環および植生の氷期・現在の再現実験によるダスト発生に対する植生変化の役割の評価、作成したフィードバック解析ツールによるモデル間の気候感度の相違の検証、など引き続き研究を行っていく予定である。

5. 計算機資源の利用状況 (2009 年 4 月～9 月)

実行ユーザ数: 7 CPU 時間 1 ノード未満: 2,562 hours,
1 ノード: 8,183 hours, 2 ノード: 0 hour, 計: 10,745 hours

6. 昨年度研究課題のまとめ

6.1. 昨年度研究課題名

MIROC 中解像度版および氷床力学モデルと炭素循環モデルを用いた古気候数値実験と温暖化予測

6.2. 昨年度研究課題の目的

今年度と同様。

6.3. 昨年度研究課題の成果概要

MIROC の氷期気候再現実験においては、現在気候に比べ深層循環が強くなるという結果が得られた。他のいくつかの結合モデルでも氷期に循環が強くなるという結果が報告されているが (Weber et al., 2008)、炭素同位体比などの古気候データによると、実際には氷期の循環は浅くて弱いものであったことが示唆されている。MIROC 氷期実験における深層循環の変化の理由を調べるため、海面の境界条件である熱フラックス

と水フラックスの効果をそれぞれ分離して評価するための海洋大循環モデルによる数値実験を考案し、いくつかの感度実験を実施した。その結果、氷期の深層循環の応答は、熱フラックス変化と水フラックスの変化の両者の相反する効果のバランスのもとで決定されていることがわかった。この他に本課題では、1) 気候感度、フィードバック解析のためのツールを作成し、前年度に行われたより高精度かつ詳細なフィードバック解析の結果と比較することでその精度や汎用性を確認した、2) 氷期における海洋炭素循環のシミュレーションを行い、当時の大気二酸化炭素濃度変化や生物生産変化に対する海洋循環やダストフラックスの役割について定量的な評価をするための実験を開始した、などの成果が得られた。

6.4. 昨年度計算機資源の利用状況

実行ユーザ数: 6 CPU 時間 1 ノード未満: 1,302 hours,
1 ノード: 25,689 hours, 2 ノード: 0 hour,
計: 26,990 hours

研究課題名：受容体-化学物質間相互作用解析に基づく生体毒性予測システムの開発

課題代表者：立教大学理学部化学科 常盤広明

共同研究者：国立環境研究所環境リスク研究センター 青木康展

日本大学医学部 山田幸子

立教大学極限生命情報研究センター 山岸賢司

実施年度：平成 21 年度～平成 21 年度

1. 研究目的

近年、生体毒性のない有用な新規化学物質を環境に負荷をかけず高効率に設計・開発するために、*in silico*（コンピュータ支援型）分子設計技術が必須のアプローチ手法となってきた。しかし、従来までの分子設計システムは生理活性物質探索の効率化に重点がおかれたものが多く、薬物化学毒性管理など多くの重大な問題が置きざりにされてきた。その一方で、情報科学的手法と量子化学理論の急速な発展を背景に、タンパク質受容体の高精度全電子計算が可能となってきた。そこで本研究では、ターゲットタンパク質受容体と各種リガンドとのヴァーチャルスクリーニングを通して、スーパーコンピュータ上で実行可能な『生体毒性予測システム』を構築し、多種多様な化学分子種に対する高効率な毒性予測を行うことを目的とする。さらには、化学物質の実験的毒性情報や詳細なメカニズムの分類データを合わせて、理論計算に基づく健康リスク評価手法を確立したい。

2. 研究計画

構造・物性が非常に多岐にわたるたくさんの化学物質が、いろいろな形で我々の生活で利用されている。そのため、散在しているこれらの化学物質の毒性情報やメカニズム分類を体系化し整理することが、化学物質の生体影響評価の点から急務とされている。とりわけ、化学物質暴露などによる遺伝子発現情報と肝毒性や神経毒性といった生体毒性との相関を理論的に予測する手法の開発が期待されている。

最近、1つの原初遺伝子から分岐した細胞核内の受容体タンパク質は、生活習慣病、がんや免疫疾患といったさまざまな疾病のターゲットとして注目されている。これらの受容体タンパク質内に、リガンド分子（ターゲット薬剤）が取り込まれると、そのリガンド分子の構造変化に伴って、タンパク質複合体も構造変化する。この *induced fitting* 効果を正しく考慮するために、フラグメント分子軌道法に基づくエネルギー勾配法を用いて、リガンド結合ポケットおよびタンパク質複合体の構造最適化計算を実行し、理論的相互作用エネルギーと結合能や生体毒性との相関を解析した。

3. 進捗状況

今年度は生体毒性予測システム構築の準備として、受容体-化学物質相互作用の初期段階にスポットを当てた。候補化合物である各種リガンド化合物が、受容体たんぱく質に結合する際に「構造変化が部分的で小さなもの」と仮定して相互作用解析を実行した。そのため、ターゲットタンパク質の結合部は比較的小さくタイトなものを選定した。具体的には、今までに計算実績のある生活習慣病などのターゲットタンパク質となっている PPAR γ と、内分泌かく乱物質の毒性予測を行うために、女性ホルモンのエストロゲンおよびプロゲステロン受容体 ER と PR などを取り上げ、さまざまなリガンドの相互作用エネルギーと受容体との結合能や毒性との間に高い相関があることを見出した。

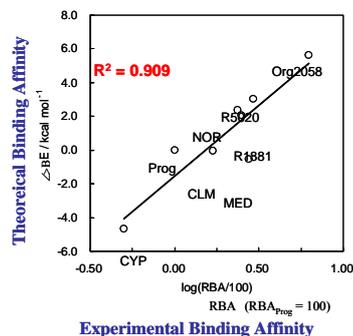


図 1 女性ホルモンプロゲステロンの受容体-リガンド化合物の実験的結合能と理論的予測値との相関。

4. 今後の計画

並列クラスタシステム上に構築した初期作成システムを国立環境研究所のスーパーコンピュータに移植し、分散力に基づく疎水性相互作用の適切な評価に欠かせない高方位量子数の基底関数を含む Møller-Plesset 摂動計算を可能にしたい。この相互作用は、細胞内シグナル伝達の実態と考えられているタンパク質のアロステリックな構造変化の伝播（アロステリックコミュニケーション）を支配している因子であり、その分子論的解明は、現代分子生物学や遺伝学上大きな課題となっている。

5. 計算機資源の利用状況（2009年4月～9月）

実行ユーザ数: 2 CPU 時間 1 ノード未満: 0 hour,
1 ノード: 0 hour, 2 ノード: 0 hour, 計: 0 hour