

## オープンソースの大気質モデルを使うとき



若 者

嶋 寺 光\*

When using an open-source air quality model

Key Words : Numerical model, Atmospheric simulation, Open source software

### 1. はじめに

筆者は、2011年3月に大阪大学大学院工学研究科の博士後期課程を修了し、電力中央研究所での2年間を経て、2013年4月より教員として大阪大学に戻り、現在に至っている。大阪大学内での所属は何度か変わっているが、研究活動については、主に、環境・エネルギー工学専攻の共生環境評価領域において大気環境を対象とする数値シミュレーションを行っている。本稿では、筆者が研究道具のひとつとして使用している Air Quality Model (大気質モデル) に関して述べる。

### 2. 大気質モデル

大気質モデルは、コンピュータ上で大気中の微量化学物質の挙動を表現するためのソフトウェアである。大気質モデルと呼ばれるものにはいくつかの種類があるが、ここでは、大気中の多種多様な化学物質と主要な物理・化学過程(移流・拡散による輸送、気相・液相・粒子表面反応による生成・消滅、降雨等による大気中からの除去、…)を考慮し、3次元空間で時々刻々と変化する濃度を予測するモデルを指すこととする。大気質モデルの用途としては、大気汚染状況の実態把握・予報、大気汚染物質の発生源寄与解析、大気環境政策(排出規制など)の評価などが挙げられる。

大気質モデルは、コンピュータの性能向上および観測・測定研究の進展とともに、各物理・化学過程のサブモデルがより精緻になり、全体として複雑化・膨大化してきている。2000年頃までは、各研究者が個別にモデル開発を行うことも珍しくはなかった。しかし現在は、大規模な研究グループで共同開発を行うことが主流となっており、個人でモデル全体を開発することはあまり現実的ではない。大気質モデルには、オープンソースソフトウェアとして全世界に公開されているものもある。利用者はモデルを一から構築する必要はなく、必要に応じて変更することができる。コンピュータスキルさえあれば大気環境シミュレーションができてしまう状況ではあるが、大気科学の素養が無ければシミュレーション結果を適切に解釈することはできない。

筆者が使用している大気質モデルのひとつに、アメリカの環境保護庁が開発を主導する Community Multiscale Air Quality modeling system (CMAQ) というものがある。CMAQは、LinuxなどのUnix系OS上で動作する、主にFortranで記述されたオープンソースの大気質モデルであり、広範な空間スケール(大陸間~都市)の様々な大気環境問題(PM<sub>2.5</sub>・光化学スモッグ・酸性雨等)に適用できる。大気質モデルが膨大化していると先述したが、本稿執筆中の2016年7月時点で最新のCMAQ version 5.1について、Fortranソースファイルの行数を数えてみたところ、合計で約50万行であった(ソフトウェアの規模を表す指標としてあまり適切とは言えないし、その程度では膨大とは言えないという意見もあるかも知れない)。また、インターネット上のCMAQ開発者・利用者のコミュニティでは、サポートやバグ報告等も行われている。この点は、モデルの開発促進や利用者の増加にも寄与していると考えられる。



\* Hikari SHIMADERA

1984年6月生  
大阪大学大学院工学研究科環境 エネルギー工学専攻 (2011年)  
現在、大阪大学 工学研究科附属オープンイノベーション教育研究センター  
助教 博士(工学) 大気環境工学  
TEL : 06-6879-7668  
FAX : 06-6879-7668  
E-mail : shimadera@see.eng.osaka-u.ac.jp

### 3. 自分で使うとき

筆者は現在まで9年近く継続してCMAQを使用している。一から始める場合は、まずLinux計算環境を構築し、CMAQをインストールすることになる。残念ながら、多くのWindowsソフトウェアのように「インストーラファイルをダブルクリック、はいはい、…、完了」とはいかない。必要な各種ライブラリ・ソフトウェアの設定を含め、コマンドライン操作でのインストール作業が必要となる。計算環境との相性（例えば、Fortranコンパイラのバージョン）等によってインストールに失敗し、原因究明に時間を割かれることも珍しくはない。最近では、筆者のスキルが多少は上がったのか、モデル更新の度に親切な設計になってきたのか、インストールが楽になったように感じる。インストール後は、可能な限り手軽に様々な計算条件に対応できるように、ソースコードのカスタマイズを行う。自由にカスタマイズできるのもオープンソースの利点である（カスタマイズしないと使い物にならないとも言える）。

大気質モデルへの入力データとして、気温・風速・降水量・日射量などの気象データや、大気汚染の原因物質の排出データは特に重要である。気象データの作成については、世界中で広く使われているオープンソースの数値気象モデル（天気予報にも使える）があるので、それほど準備に手間はかからない。一方、排出データの作成については、CMAQ付属プログラムは標準ではアメリカにしか対応していない。筆者は東アジア～日本の都市圏を主な対象としているため、対象物質（窒素酸化物・硫黄酸化物・有機化合物・粒子状物質等）、発生源（自動車・発電所等の人為起源、植物・火山等の自然起源）、地域（日本・東アジア・全球等）などが異なる様々な排出量データセットを統合・変換するためのプログラムを用意する必要がある。また、出力データの処理・可視化についても、特に標準の方法というものはないので、結局、自作のプログラムを使うことになる。

入力・実行・出力の一連の処理ができる環境を整えて、ようやく大気環境シミュレーションが可能となる。シミュレーション結果は、観測データとの比較等により、それが妥当であると判断される場合のみ、各種用途に適用することができる。とは言え、大気環境は絶えず変化しており、観測は限られた時間・場所・物質についてしか行うことはできない

め、大気環境にはまだまだ不明な点も多く、大気質モデルにもまだまだ課題は多い。したがって、筆者を含む世界中の研究者によって大気質モデルの改良に向けた研究も日々行われ、それらを反映してモデルが更新される。更新版を新たに使うときには、更新情報やソースコード変更箇所を確認し、旧版～更新版の計算結果の変化について検証する。更新によってバグが修正されることもあれば、新たなバグが出現することもある。モデルの挙動がおかしいと感じたときには、バグがあるか、筆者の理解が間違っている。

### 4. 学生が使うとき

先述の通り、筆者は共生環境評価領域で研究を行っているので、この研究室の学生指導も行っている。共生環境評価領域の学生数は、本稿執筆時点で合計28名であり、現在のところ研究で大気質モデルを使う（予定の）学生はそのうちの9名である。ちなみに、筆者がこの研究室に配属された10年前には学生数は15名であった。他の研究室でも学生数はこれほど変化するものなのだろうか。

大気質モデルがブラックボックス化してしまう懸念はあるが、研究室の学生には、基本的には筆者によるカスタマイズ版を使ってもらおう。現在は、高校生でも当たり前のようにパソコンを使っての表計算やプレゼン資料作成を経験している。しかし、コマンドライン操作に触れる機会はあまり無いようで、研究室に配属されるまで経験なしという学生も珍しくはない。そのような学生に、最初から自力で大気質モデルを使える環境を構築させるのは無理がある。まずは比較的手軽に動かせる状態で使い、徐々に中身への理解を深めていく、という方針にしている。ソースコードは全て読める状態であり、Linuxやプログラミング言語の学習教材は豊富にあるので、わからないところは可能な限り自分で調べて、それでもわからなければ質問してくれれば良い。コマンドライン操作の基礎から順を追って教えていくべきなのかも知れないが、コンピュータスキルの向上は目的ではないし、大気質モデルの使用も研究手段のひとつでしかない。シミュレーション結果の適切な解釈ができるように大気科学について学ぶことなど、研究を進める上で重要なことは他にも多くある。学生には、時間を含め様々な制約がある中で目的を達

成するための取り組み方について、自分で考える力を身に付けて欲しい。

## 5. おわりに

最近オープンソースの大気質モデルの利用希望者が増え、学外から筆者のカスタマイズ版や関連プログラムの提供を求められることも増えてきている。筆者が役に立てるのであれば、積極的に貢献していきたい。ただし、オープンソースソフトウェアを利用した著作物について、学内限定で使う分にはあまり問題になることはないが、外部に再頒布するとき

にはライセンス体系等に十分注意する必要がある。また、学外者向けに大気質モデル講習会も実施していく予定である。順調にいけば本稿が印刷されるまでに第1回が開催されているはずであるが、果たして…。

## 謝辞

本稿執筆の機会を与えてくださいました大阪大学大学院工学研究科教授の栗津邦男先生ならびに「生産と技術」関係者の皆様に深く御礼申し上げます。

