

## 近年来大气气溶胶模式研究综述\*

颜 鹏<sup>1)2)</sup> 李维亮<sup>2)</sup> 秦 瑜<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>(北京大学大气科学系,北京 100871)

<sup>2)</sup>(中国气象科学研究院,北京 100081)

### 摘 要

该文对当前大气气溶胶模式的发展和应用作了简单的回顾和评述,介绍了较流行的几个气溶胶热力学平衡模式和适用于城市-区域空气质量研究的气溶胶模式的特点,并对发展一个完全的气溶胶动力-化学模式的复杂性进行了探讨,指出未来气溶胶模式发展和改进还需要在有机气溶胶的形成和转化机制,云、雾等条件下气溶胶的形成和转化,以及复杂的气溶胶物理、化学过程与区域、全球模式的耦合等几个方面进行研究。

关键词:气溶胶模式 评述 模式发展和改进

### 引 言

大气气溶胶是悬浮于大气中的化学混合的固体或液体粒子,其大小从几个纳米到10个微米以上。由于大气气溶胶在气候、环境等方面的重要作用,近年来越来越引起科学界的重视。

大气气溶胶(尤其是较细小粒子)可以通过呼吸进入人体内,对人体健康造成危害,尤其对呼吸系统和心血管系统有较大危害<sup>[1,2]</sup>;从气候变化的观点来看,人为产生的气溶胶可能造成负的辐射强迫,其量级与温室气体产生的正强迫相当。2001年IPCC报告给出的全球平均气候系统的辐射强迫显示,目前估计的气溶胶直接强迫:硫酸盐为 $-0.4 \text{ W/m}^2$ ,生物燃烧气溶胶为 $-0.2 \text{ W/m}^2$ ,化石燃料产生的有机碳为 $-0.1 \text{ W/m}^2$ ,无机碳(soot)为 $+0.2 \text{ W/m}^2$ 。但这种估计的不确定性是相当大的,其主要原因是确定全球气溶胶的浓度分布和气溶胶辐射特性有极大的困难<sup>[3-5]</sup>。气溶胶的光学特性以及成云特性依赖于气溶胶的化学成分、粒子尺度分布、以及粒子的吸湿性等。Kiehl等<sup>[6]</sup>的计算表明,粒子的平均大小和化学中和特性的变化对气溶胶的光学性质有很大影响。因此为了减少这种不确定性,一个重要的方面是改进对大气气溶胶的认识,加强对大气气溶胶各种化学成分(包括硫酸盐以及沙尘、海盐、EC/OC等)、粒子尺度分布以及光学特性的全面了解。为此除需要大量的观测试验外,数值模拟研究是改进对大气气溶胶浓度、尺度分布和化学组成认识的重要手段。

用模式模拟大气气溶胶尺度、化学组成的变化要比模拟气态污染物的变化复杂得多。

\* 由《国家重点基础研究发展规划》项目:首都北京及周边地区大气、水、土壤环境污染机理与调控原理(G1999045700)及国家自然科学基金重大国际合作项目(401211208227)联合资助。

2003-05-09 收到,2003-07-16 收到修改稿。

这种复杂性主要表现在气体和粒子的物理特征不同。空气质量模式在处理气体时,气体分子的大小通常是不重要的,但与此相反,模式在处理气溶胶时,粒子的大小是最重要的考虑。气体和粒子的相互作用在很大程度上与粒子大小有关。一旦气体浓度已知,其相应的分子数也就确定了,但粒子不同。因此,在空气质量模式中包含气溶胶就要决定如何去表征粒子的总数、总质量和粒子尺度分布和不同大小粒子的化学组分,以及如何表征粒子的主要物理、化学过程(如核化、凝结、碰并、蒸发、沉降、化学转化等等)。由于大气中气溶胶尺度量级跨度大,且不同大小的粒子,其来源和形成机制也不相同,因此与气体模式不同,模式中考虑气溶胶要加入一系列新的物理、化学过程。此外实际观测的大气气溶胶(收集到膜上)通常包含许多种化学成分,然而单个气溶胶有的可以只包含一种化学成分,即外部混合(external mixture),或者很多种化学成分均匀地包含于一个单一气溶胶中,即内部混合(internal mixture),或者是部分外部混合,部分内部混合,同时化学物种的分摊比例会随不同粒子尺度而变化,也可以因不同地点、不同时间、或不同的来源而变化<sup>[7]</sup>。这种不同的粒子结构,使得实际大气气溶胶的模拟更为困难。在大多数的气溶胶模式中,通常假定粒子是内部混合的,即所有给定尺度大小的粒子具有相同的化学组分。

开展气溶胶模式研究大约起于20世纪70年代,如Chu和Seinfeld<sup>[8]</sup>、Peterson和Seinfeld<sup>[9]</sup>、Gelbard和Seinfeld<sup>[10,11]</sup>。早期的气溶胶模式通常在物理、化学过程上非常简单。其后发展了许多或侧重于气溶胶微物理过程,或是基于气-粒化学平衡理论的气溶胶模式,并发展了气溶胶分档处理的方法研究气溶胶谱变化特征。

针对不同的应用,近年来发展了很多种类的气溶胶模式。Seigneur等<sup>[12]</sup>根据模拟时间的长短把气溶胶模式分为短期模式(episodic model)和长期模式(long-term model)等。由于长期模式(Long term)通常采用的是较简化的化学、物理机制,本文不讨论这类模式。

对于一个气溶胶模式,按其考虑的物理、化学过程,可区分为热力学平衡模式和动力学模式,当然也有按气溶胶大小是否分档处理来区分的分档模式和不分档模式,或其它划分方法。无论是热力学平衡模式或者是动力学模式,由于研究目的不同,模式对气溶胶的处理都可以采用分档或不分档处理。当人们关注气溶胶的总体粒子浓度和化学成分等特征,不分档模式即可以满足要求,但如果需要了解与粒子尺度分布相关的性质时,如气溶胶对辐射的影响时,就必须模拟气溶胶的粒子尺度分布。气溶胶动力学模式考虑气溶胶形成过程中的核化(nucleation)、凝结增长(condensation growth)、聚并(coagulation)、溶解(dissolution)、蒸发(evaporation)、沉降(sedimentation)等过程;而平衡模式考虑的是气体与粒子之间的热力学平衡,已知物种的总量(包括气相与气溶胶相),通过求解平衡方程或通过使该系统的Gibbs自由能达到最小来求得平衡后的化学组成及气溶胶状态。事实上,在某些情况下,当达到平衡所需的时间比较气体与粒子间输送时间为长时,这种平衡近似不太适用<sup>[13,14]</sup>。如Wexler等<sup>[15]</sup>对在加利福尼亚观测的铵和硝酸盐的尺度分布数据分析就发现,确实存在偏离平衡态的现象,即热力学平衡并不能决定铵盐凝结时的尺度分布,而只有输送过程和热力学性质共同考虑,才能决定铵盐在不同尺度上的分布。

## 1 气相和气溶胶相的热力学平衡模式

热力学平衡是指在一定的热力学条件下,两相间物质输送达到动态平衡。许多研究

表明,虽然在某些情况下,当达到平衡所需的时间比气体和气溶胶接触并进行物质输送的时间为长时,平衡近似有相当大的偏差,但在通常情况下,气-粒之间质量相互传输的特征时间在 1 秒以下的量级<sup>[16,17]</sup>,挥发性物种在气态和气溶胶态可近似认为达到化学平衡<sup>[18~24]</sup>。大气气溶胶平衡模式是分析环境大气气溶胶观测数据,开展大气气溶胶预报的一个重要的工具,也是发展更复杂的气溶胶化学-动力模式的基础。利用化学平衡模式可以算得化学平衡时的一些重要量,而这些量在实际测量中又很难得到,如气溶胶粒子的含水量和酸度等。气溶胶的含水量对估算气溶胶粒子质量、大小、以及光学性质至关重要。而酸度是评估可吸入颗粒物对健康影响的重要参量,它同时还对潮解时气-液间的物质交换有作用。当前测量气溶胶酸度的方法是测量气溶胶溶于水后的溶液的 pH 值,但 Saxena<sup>[25]</sup>指出,这种方法测得的 pH 值并不是大气气溶胶的实际酸度,实际酸度必须用化学平衡模式计算。另一方面,在某种程度上说,所有的气溶胶模式都要进行热力学的平衡计算,这是因为挥发性(或蒸气态)物质在气态与气溶胶态之间的质量输送是由环境大气的浓度与该物质在平衡态时的浓度差驱动的<sup>[26]</sup>。因此,一个热力学平衡模式是任何气溶胶模式的必需组成部分。

对于一个温度和压力分别为  $T$ 、 $p$  封闭体系,其化学平衡的条件是系统的总 Gibbs 自由能  $G$  达到最小,即平衡时的化学组成使得系统的 Gibbs 自由能最小:

$$\min G(T, p, n_i) \quad (1)$$

其中  $n_i > 0$ , 表示系统某物种的浓度。与 Gibbs 自由能最小的平衡条件等价<sup>[16]</sup>, 有关系式:

$$\sum \nu_{ij} \mu_i = 0 \quad (2)$$

其中,  $\nu_{ij}$  是  $j$  反应中  $i$  物种的化学计量系数,  $\mu_i$  是  $i$  物种的化学势。

$$\mu_i = \mu_i^0(T) + RT \ln a_i \quad (3)$$

$\mu_i^0(T)$  是标准状态下的化学势,  $a_i$  等于  $i$  物种的活度。

$$\sum \nu_{ij} \mu_i^0 + RT \ln \prod a_i = 0 \quad (4)$$

或

$$\exp(-\sum \nu_{ij} \mu_i^0 / RT) = \prod a_i \equiv K_j(T) \quad (5)$$

$K_j(T)$  是第  $j$  反应的平衡常数, 是温度  $T$  的函数。

对平衡模式, 有四个热力学性质对估计气-粒转化非常重要: (1) 平衡常数  $K$  或化学势 ( $\mu$ ); (2) 溶液活度系数 ( $\gamma$ ); (3) 水的活度 ( $a_w$ ); (4) 潮解时的相对湿度 ( $DRH$ )。

前面三个决定了各个组分的浓度, 第四个决定了固体物质可以存在的最大可能相对湿度<sup>[27]</sup>。

在过去的 15 ~ 20 年里, 发展了许多基于热力学平衡原理计算无机气溶胶的化学成分和物理状态模式。这些模式主要有 EQUIL<sup>[16]</sup>, MARS<sup>[23]</sup>, SEQUILIB<sup>[24]</sup>, AIM (AIM2)<sup>[28,29]</sup>, SCAPE (SCAPE2)<sup>[27,30,31]</sup>, 以及 EQUISOLV (EQUISOLV2)<sup>[32,33]</sup>, ISORROPIA<sup>[26]</sup>, GFEMN<sup>[34]</sup>等。在已有的这些平衡模式中, 其主要差别在于所用计算方法和热力学处理方式的复杂性与严格性方面, 以及模式所考虑的化学组分上。Kim<sup>[27]</sup>曾总结了 EQUIL、KEQUIL、MARS、SEQUILIB、AIM、SCAPE 几个有代表性的平衡模式的特点

与差异, Pilinis<sup>[35]</sup>进一步评述包括了 EQUISOLV 和 ISORROPIA 模式, 其对比结果见表 1。

表 1 几个气-粒平衡模式的特点

	EQUIL、KEQUIL	MARS	SEUILIB	AIM
多元活度系数	Kusik- Meissner( K- M)	Bromely	Bromely	K- M
二元活度系数	K- M	Pitzer	Pitzer	K- M
水的活度	K- M	ZSR	ZSR	ZSR
Kelvin 效应	是	无	无	无
MDRH <sup>+</sup>	无	无	无	-
化学物种	硫酸盐、硝酸盐、铵	硫酸盐、硝酸盐、铵	硫酸盐、硝酸盐、铵、钠、氯	硫酸盐、硝酸盐、铵、钠、氯
液相组分	H <sup>+</sup> 、NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> 、NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 、HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> 、SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> 、H <sub>2</sub> O	H <sup>+</sup> 、NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> 、NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 、HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> 、SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> 、H <sub>2</sub> O、NH <sub>3</sub>	H <sup>+</sup> 、NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> 、Na <sup>+</sup> 、NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 、Cl <sup>-</sup> 、HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> 、NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 、Cl <sup>-</sup> 、SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> 、SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> 、H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、H <sub>2</sub> O	H <sup>+</sup> 、NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> 、Na <sup>+</sup> 、H <sub>2</sub> O
固相组分	NH <sub>4</sub> HSO <sub>4</sub> 、(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub> 、NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub> 、(NH <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> H(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> 、(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> •2NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub> 、(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> •3NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	NH <sub>4</sub> HSO <sub>4</sub> 、NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub> 、(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、(NH <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> H(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	NH <sub>4</sub> HSO <sub>4</sub> 、NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub> 、同 SEUILIB、(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、NaCl、NH <sub>4</sub> Cl、NaNO <sub>3</sub> 、NaHSO <sub>4</sub> 、Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、(NH <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> H(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	同 SEUILIB
气相组分	NH <sub>3</sub> 、HNO <sub>3</sub> 、H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、H <sub>2</sub> O	NH <sub>3</sub> 、HNO <sub>3</sub> 、H <sub>2</sub> O	NH <sub>3</sub> 、HNO <sub>3</sub> 、HCl、H <sub>2</sub> O	NH <sub>3</sub> 、HNO <sub>3</sub> 、HCl、H <sub>2</sub> O
	EQUISOLV	ISORROPIA	SCAPE	
多元活度系数	Bromely	Bromely	Bromely、K- M、Pitzer	
二元活度系数	Pitzer	K- M	K- M	
水的活度	ZSR	ZSR	ZSR	
Kelvin 效应	无	无	无	
MDRH <sup>+</sup>	无	是	无	
化学物种	硫酸盐、硝酸盐、铵、钠、氯	硫酸盐、硝酸盐、铵、钠、氯	硫酸盐、硝酸盐、铵、钠、氯	
液相组分	Na <sup>+</sup> 、Cl <sup>-</sup> 、NH <sub>3</sub> 、H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、HNO <sub>3</sub> 、H <sup>+</sup> 、NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> 、OH <sup>-</sup> 、NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 、NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 、HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> 、SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> 、H <sub>2</sub> O	Na <sup>+</sup> 、Cl <sup>-</sup> 、NH <sub>3</sub> 、H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、HNO <sub>3</sub> 、H <sup>+</sup> 、NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> 、OH <sup>-</sup> 、Cl <sup>-</sup> 、HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> 、SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> 、H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 、HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> 、SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> 、H <sub>2</sub> O	H <sup>+</sup> 、NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> 、Na <sup>+</sup> 、OH <sup>-</sup> 、NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> 、NH <sub>3</sub> 、H <sub>2</sub> O	
固相组分	NH <sub>4</sub> HSO <sub>4</sub> 、(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub> 、NH <sub>4</sub> Cl、NaCl、NaNO <sub>3</sub> 、NaHSO <sub>4</sub> 、Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 、NH <sub>4</sub> HSO <sub>4</sub> 、(NH <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> H(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> 、NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub> 、NH <sub>4</sub> Cl、NaCl、NaNO <sub>3</sub> 、NaHSO <sub>4</sub> 、Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	同 SEUILIB	
气相组分	NH <sub>3</sub> 、HNO <sub>3</sub> 、HCl、H <sub>2</sub> O	NH <sub>3</sub> 、HNO <sub>3</sub> 、HCl、H <sub>2</sub> O	NH <sub>3</sub> 、HNO <sub>3</sub> 、HCl、H <sub>2</sub> O	

注: MDRH: 共同潮解湿度( Mutual Deliquescence Relative Humidity)

计算多元活度系数的方法: Bromely、K- M 和 Pitzer( Bromely, 1973; Kusik and Meissner, 1978; Pitzer, 1986)<sup>[36-38]</sup>。

水的活度计算, ZSR: Zdanovskii, Stokes and Robinson 方法( Stokes and Robinson, 1966)<sup>[39]</sup>。

从表 1 可以看出, 各个模式在计算热力学平衡时的热力学控制变量、计算二元和多元活度系数的方法、以及是否考虑气溶胶颗粒的曲率影响等都有差别。此外不同模式考虑的化学物种个数、不同相态化学成分等也不尽相同。

除表 1 所列出的不同外, 上述几个模式在考虑的化学组分数目、化学反应方程个数、

气溶胶是否有尺度分档,以及采用的计算方法等也有不同。从计算方法上看,EQUIL、KEQUIL 模式通过解一系列关于化学势的非线性方程,来计算各组分的平衡浓度,而 AIM 是通过直接使系统的 Gibbs 自由能最小化来计算的。这几个模式在计算浓度时没有采取任何近似,因此所费时较大;另外 EQUIL、KEQUIL 模式还采用了按气溶胶尺度分档的方法,假定在每一个尺度档上,粒子的化学组分与气相成分平衡。MARS 和 SEQUILIB 是针对与空气质量模式相连接的需要发展起来的,因此计算效率是该模式的重要考虑,它把浓度计算按情况分别采用近似方法,其精度依赖于所采用的近似方法。SCAPE 模式则在比较了前面几种模式算法的基础上,选择在计算上效率较高,且具有足够精度的算法,能够给出较好的结果,但对于有些无机气溶胶或某些混合体系(如  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ , NaCl-KCl 体系等),由于气溶胶质量变化与相对湿度(RH)的关系还与环境相对湿度的历史有关<sup>[34,40,41]</sup>,SCAPE(SCAPE 2)模式很难模拟气溶胶的这种多阶段行为<sup>[34]</sup>。与上面模式不同,EQUISOLV<sup>[32]</sup>模式采用了不同的计算方式,其平衡浓度是在给定初始猜场下,分别求解单个平衡方程,经过反复迭代,最后得到收敛的浓度场。这种方法的优点是易于增加新的物种和方程,但缺点是计算量太大。而 ISORROPIA<sup>[26]</sup>则通过获得尽可能多平衡方程的解析解,以减少迭代次数,并在计算中尽可能利用查表方法,因此虽然模式考虑的物种较多,但其计算速度也是较快的。

近期,Zhang 等<sup>[42]</sup>对 MARS-A、SEQUILIB、SCAPE2、EQUISOLV2、AIM2 等 5 个无机气溶胶热力学平衡模式在各种条件下进行了全面的比对,其结果显示,SCAPE2、AIM2、EQUISOLV2 三个模式虽然在某些浓度和相对湿度下,计算结果有差别,但总体上一致。SCAPE2 和 EQUISOLV2 可以在任何条件下应用,而其它几个模式或者因在某种条件下计算不稳定需要改进,或者模式只在一定的条件时适用。

虽然平衡模式在解决一些问题时给出了较好的结果<sup>[43]</sup>,但由于实际大气气溶胶的复杂特性,平衡模式目前还主要用于处理气溶胶的无机成分。同时在一些情况下,气-粒之间的平衡关系并不成立,气-粒之间的物质输送过程不能不予考虑<sup>[13,44]</sup>。

## 2 气溶胶动力-化学模式

研究大气气溶胶的物理状态和组成以及气溶胶在区域和全球尺度上的分布是大气气溶胶研究的最重要的一个方面,尤其是研究人类活动产生的气溶胶对大气过程和气候强迫的扰动。由于有关气溶胶的形成、转化过程非常复杂,仅用热力学平衡模式是远远不够的。而要建立一个完全的气溶胶动力-化学模式,不仅要求了解复杂的气溶胶物理化学机制(其中有一些机制目前人们还知之甚少)如气溶胶与云的相互作用等,考虑的物种要求尽可能全面,对气溶胶尺度分布的描述要尽可能准确,而且一个包含气象-气态-气溶胶的动力-化学模式对计算能力的要求也是相当高的。因此用数学模式综合研究大气气体和气溶胶物质的演变(包括气溶胶的形成、化学成分、动力输送、沉降和化学转化等)也还是近年来才开始的。

大气气溶胶在形成和演变过程中,随时间、地理位置、粒子产生的途径等不同,气溶胶的大气数浓度、质量浓度、尺度分布、化学组成等是不同的。影响大气中气溶胶粒径和化

学组分演变动力过程主要有:

(1) 核化过程(nucleation) —均相或多相核化过程;(2) 凝结增长过程(condensation growth);(3) 聚并过程(coagulation);(4) 去除过程(removal)

除上述关于气溶胶粒子形成、演变动力过程外,控制大气气溶胶空间分布和时间变化的平流、扩散等大气运动过程以及化学转化过程也是区域和全球尺度气溶胶模式中重要的方面。在过去十几年里,针对不同的研究目的,发展了许多不同复杂程度的气溶胶动力-化学模式。模式从侧重于研究气溶胶形成机制到与复杂的空气质量模式结合研究城市、区域环境污染问题,甚至研究气溶胶的全球气候影响问题。如 Russell 等<sup>[45~47]</sup>用一个轨迹模式研究 Los Angeles 地区硝酸盐气溶胶的特性,但模式没有考虑气溶胶的尺度分布;Pandis 等<sup>[48]</sup>用一个拉格朗日型轨迹模式结合简化的二次有机气溶胶产率模型,研究了二次有机气溶胶的形成、输送和沉降规律,并应用于 Los Angeles 地区空气污染事件研究;Pinlinis 等<sup>[24,49]</sup>用三维欧拉光化学气相-气溶胶模式,研究 California 南部地区气溶胶的化学特性,该模式采用 CIT 空气质量模式计算气体浓度<sup>[50]</sup>,把气溶胶分为三个宽的尺度档考虑。Meng 等<sup>[51]</sup>进一步利用更新的 CIT 空气质量模式<sup>[52]</sup>,发展了一个具有更多化学物种、更高尺度分辨的气溶胶动力模式,把气溶胶分为 8 个尺度档处理。Toon 等<sup>[53]</sup>, Westphal 等<sup>[54]</sup>研究了 Sahara 沙漠沙尘粒子的输送问题,在他们的模式中气溶胶按大小分为 30 个尺度档,能给出沙尘粒子在输送过程中粒子谱演变特征,但模式没有考虑粒子聚并等物理过程(对沙尘气溶胶,聚并过程相对并不重要),也没考虑粒子的化学成分演变。Kotz 等<sup>[55]</sup>用欧洲酸沉降模式(EURAD) —区域酸沉降模式(RADM)的一个版本,发展了一个大气气溶胶模式,但没考虑气溶胶的尺度分布;丹佛空气质量模式(DAQM), RADM 模式的另一个版本,虽然包括的物种多一些<sup>[56]</sup>,但也只考虑了气溶胶粒子的质量分布。Binkowski 等<sup>[57]</sup>发展了区域颗粒物模式(RPM),模式考虑了气溶胶化学、输送、以及核化、凝结、聚合等气溶胶动力学机制,同时对气溶胶尺度分布采用 Whitby<sup>[58]</sup>提出的模态分布模型,可以输出气溶胶尺度分布的部分信息。与此相似的还有 MADE 模式(Modal Aerosol Dynamics Model for Europe)<sup>[59]</sup>,也是采用气溶胶尺度的模态分布形式。Wexler 等<sup>[60]</sup>则发展了一个适用于城市、区域的气溶胶模式,该模式针对热力平衡理论的不足,考虑了气-粒之间的质量输送对气溶胶化学成分和粒子尺度分布的影响,模式方程包括排放、沉降、平流、扩散、凝结、蒸发、聚并、核化等气溶胶动力过程,并与气相化学模式 UAM(Urban Airshed Model)<sup>[61]</sup>结合,计算气溶胶的尺度分布与化学成分。该模式对气溶胶微物理过程处理较细致,但考虑的气溶胶化学成分较少,化学过程也很简单。Lurmann 等<sup>[62]</sup>进一步发展了 Wexler 等<sup>[60]</sup>的气溶胶模式,称之为 UAMAERO 模式,与 UAM-IV 空气质量模式结合,应用于南加州空气质量研究(Southern California Air Quality Study, SCAQS)。Jacobson<sup>[63~65]</sup>发展了一个包括气相、气溶胶相化学、传输、辐射的空气质量模式(GATOR),模式采用了新的分档结构(moving-center size structure),考虑了气溶胶的排放、气溶胶动力学、化学以及散射和吸收等,可以给出气溶胶较细致的粒子尺度分布和化学组分。Yu 等<sup>[66,67]</sup>在 Jacobson<sup>[64]</sup>的气溶胶模式基础上,加入新的离子核化机制,发展了一个包括粒子核化、增长等微物理过程在内的分档气溶胶箱模式,并应用于飞机排放、汽车尾气等的气溶胶产生机制研究,但由于模式结构和算法的复杂性,应用到区域性的空气

质量模式或全球模式中还有很大的困难。

另外,还有许多光化学模式包括气溶胶动力过程模块,Russell 等<sup>[68]</sup>对此作了总结,这些模式有:SAQM AERO<sup>[69]</sup>, URM<sup>[70]</sup>,以及 MODELS-3/CMAQ 的气溶胶模式(RPM)<sup>[57,71]</sup>等等。

我国科学家在气溶胶模拟方面也作了许多工作。赵春生等<sup>[72]</sup>建立了一个包含气溶胶微物理过程并可以描述粒子尺度变化的大气气溶胶动力模式,加入一个简化的海洋 DMS 化学机制,模拟了遥远海洋大气边界层典型气象条件下由 DMS 到 CCN 的形成过程。黄美元等<sup>[73]</sup>设计和建立了适合东亚地区的沙尘气溶胶模式,该模式包括新的起沙机制模型,粒子采用分档处理(按比例分为 9 个尺度档),并考虑了一定条件下的气溶胶微物理过程。

上述模式虽然在物理化学机制和计算方法上,以及模式处理的复杂程度上有许多差别,但总体看来,各气溶胶模式的主要区别在于对二次有机气溶胶(SOA)以及气溶胶粒子谱分布的处理。如大多模式对 SOA 采用集总产率的近似方法,而 GATOR 是根据挥发性有机物 VOCs 的水溶性进行气-粒分离(这种方法对极性有机分子较适用)。CIT 模式对

表 2 几个常用城市-区域尺度空气质量模式气溶胶模式的特点

	GATOR AERO	MODEL3/CMAQ-RPM	CIT-AERO	UAM-AERO
模式应用区域	三维欧拉多层非嵌套模式,可用于城市、区域和全球尺度的模拟	三维欧拉多层嵌套模式,可用于城市、区域尺度模拟	三维欧拉多层非嵌套模式,用于城市尺度的模拟	三维欧拉多层非嵌套模式,用于城市尺度的模拟
驱动的空气 质量模式及 其气相化学 机制	GATOR 气相化学机制采用: Atkinson <sup>[74]</sup> , DeMore <sup>[75]</sup> (无机); Gery <sup>[76]</sup> , Atkinson <sup>[74]</sup> (有机)	MODE3/CMAQ 气相化学机制采用 RADM2、CB-IV、SAPRC99(2002 年的版本)	CIT 气相化学机制采用 Harley 等 <sup>[77]</sup> 的化学机制	UAM-IV 气相化学机制用 SAPRC90
气溶胶热 力学	EQUISOLV 假定无机气溶胶气-粒达到热力学平衡	MARs ISORROPIA (2002 年的版本),假定无机气溶胶气-粒达到热力学平衡	SCAPE2(只用于计算气溶胶表面无机成分蒸汽浓度),考虑气-粒间非平衡质量输送	SEQUILIB,假定无机气溶胶气-粒达到热力学平衡
气溶胶尺度 分布	所谓 Moving-center size structure:气溶胶分档个数和大小可调	模态分布:细模态和粗模态,包括 PM <sub>2.5</sub> 和 PM <sub>10</sub> ,对数正态分布	分档处理:粒径从 0.04~10 μm 分为 8 个尺度档	分档处理:粒径从 0.04~10 μm 分为 8 个尺度档
二次无机气 溶胶	NH <sub>3</sub> - H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> - HNO <sub>3</sub> - HCl - Na - H <sub>2</sub> O,气相和液相化学	NH <sub>3</sub> - H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> - HNO <sub>3</sub> - H <sub>2</sub> O,气相和液相化学	NH <sub>3</sub> - H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> - HNO <sub>3</sub> - HCl - Na - H <sub>2</sub> O,气相和液相化学	NH <sub>3</sub> - H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> - HNO <sub>3</sub> - HCl - Na - K - Ca - Mg - H <sub>2</sub> O - CO <sub>2</sub> ,气相和液相化学
二次有机气 溶胶(SOA)	根据 VOCs 的水溶性进行气-粒分离(对极性有机分子较适用)	采用 Pandis 等 <sup>[48]</sup> 有机气溶胶产出率的方法估算	对半挥发性有机物采用吸收机制处理气-粒转化	采用 Pandis 等 <sup>[48]</sup> 方法,通过计算可凝结有机物的气溶胶产出率估算
模式来源 相关文献	Jacobson <sup>[63-65]</sup>	Binkowski 等 <sup>[57]</sup> , Byun 等 <sup>[71]</sup>	Meng 等 <sup>[51]</sup> , Harley 等 <sup>[77]</sup>	Lurmann 等 <sup>[62]</sup> Wexler <sup>[60]</sup>

注:RADM: Regional Acid Deposition Model; CB-IV: Carbon Bond Mechanism IV; SAPRC: Statewide Air Pollution Research Center

SOA 采用吸收机制,即可凝结有机物通过被吸收转化为气溶胶。在粒子谱分布上,有的

模式采用模态分布,有的采用分多个尺度档的方式研究粒子谱的演变。如 GATOR 采用一种称之为中心移动结构(moving center size structure)的粒子分档技术;MODEL3/CMAQ 采用模态分布形式,把粒子分为细模态和粗模态。

由于这类气溶胶模式常用来研究区域空气质量、烟羽扩散等问题时,需要结合气象模式以及气相-液相化学模式,因此对这类气溶胶模式要求在计算上是高效的。

参考 Russell 等<sup>[68]</sup>、Seigneur 等<sup>[12]</sup>、Meng 等<sup>[51]</sup>的工作,介绍几个常用城市-区域尺度空气质量模式气溶胶模式的特点(表 2)。

对这类模式,由于气溶胶形成和转化的复杂性以及尚有许多机制还不清楚,模式在许多方面还需要很大的改进,其中主要的是:在有雾或云的情况下,对硫酸盐和硝酸盐形成的处理以及对二次有机气溶胶(SOA)形成机制的处理上还需要进一步改进<sup>[12]</sup>。

### 3 结 语

综上所述,得出气溶胶模式在最近 10~20 年的发展是很快的,但一个既包括复杂的气溶胶热力学平衡过程,又考虑气溶胶粒子核化、凝结、蒸发等动力过程以及化学转化、平流、扩散等在内的模式的发展还有很多困难,距离模式的成熟和完善还很远。发展一个完全的气溶胶动力-化学模式,并用以研究气溶胶的区域、全球分布和输送规律,是研究气溶胶的直接辐射效应、气溶胶与云的相互作用及其对辐射平衡的间接效应等重要途径。气溶胶热力学平衡模式是发展气溶胶化学-动力模式的基础。现阶段气溶胶热力学平衡模式的应用和发展一方面向包括更多化学组成和尺度分辨能力,以及提高计算方法的精度,去研究气溶胶气-粒平衡过程的物理、化学机制,同时对偏离热力学平衡态情况,通过考虑细致的气-粒之间质量输送、粒子形成与增长等物理过程,研究粒子形成和转化机制;另一方面,是在满足一定的精度要求下,尽量提高计算效率以与区域和全球化学-输送模式结合,发展包括气象、气溶胶化学、气溶胶动力学机制等在内的综合模式,以研究区域、全球气溶胶分布、转化和输送规律,并为改进气溶胶气候强迫的计算提供保证。

由于实际大气气溶胶个体之间也有较大的差异,仅用内部混合方式处理气溶胶的化学组成及其它物理化学性质(如潮解点等)也与实际不符,因此开展单个气溶胶物理、化学特性研究,以及不同粒子形成机制的研究是精确模拟大气气溶胶的另一个重要方面。

近年来大量的观测表明,气溶胶中有机成分含量较高,尤其对细粒子,在有些地区有机成分甚至可达 50% 左右<sup>[78]</sup>,而目前对有机气溶胶的形成、转化机理却相对了解较少。这都给发展一个完全的气溶胶化学-动力模式(包括气相-液相-固相过程)带来了极大困难。此外对有云、雾等条件时气溶胶的形成、转化研究,目前大多数模式还都缺乏很好的模拟能力。而云与气溶胶的相互作用是研究气溶胶的重要方面,为此必须进行大量的观测和试验研究。

最后,和其它模式一样,对模式的评估要求建立一套综合的气溶胶数据库,该数据库要求提供气溶胶及其前体物气体浓度、排放源等的系统资料,和相应的气象数据。为此通过大量的实际观测和调查建立综合的气溶胶数据库是必不可少的。



## 参 考 文 献

- 1 Dockery D W, Pope III C A, Xu X, et al. An association between air pollution and mortality in six U S cities. *New England J Med*, 1993, **329**: 1753 ~ 1759.
- 2 Schwartz J, Dockery D W, Neas L M. Is daily mortality associated specifically with fine particles? *J Air Waste Manag Assoc*. 1996, **46**: 927 ~ 939.
- 3 Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). Climate Change 1995. In: Houghton J T et al. eds., New York: Cambridge Univ Press, 1996.
- 4 Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). Climate Change 2001: The Scientific Basis. In: Houghton J T et al. eds., New York: Cambridge Univ Press, 2001.
- 5 Schwartz S, Andreae M O. Uncertainty in climate change caused by aerosol. *Science*, 1996, **272**: 1121 ~ 1122.
- 6 Kiehl J T, Briegleb B P. The relative roles of sulfate aerosols and greenhouse gases in climate forcing. *Science*, 1993, **260**: 311 ~ 314.
- 7 Sloane C S. Optical properties of aerosols of mixed composition. *Atmos Environ*, 1984, **18**(4): 871 ~ 878.
- 8 Chu K J, Seinfeld J H. Formulation and initial application of a dynamic model for urban aerosols. *Atmos Environ*, 1975, **3**: 375 ~ 402.
- 9 Peterson T W, Seinfeld J H. Mathematical model for transport, inter-conversion and removal of gaseous and particulate air pollutants—application to the urban plume. *Atmos Environ*, 1977, **11**: 1171 ~ 1184.
- 10 Gelbard F, Seinfeld J H. The general dynamic equation for aerosols: Theory and application to aerosols formation and growth. *Jour of Colloid and Interface Science*, 1979, **68**: 363 ~ 382.
- 11 Gelbard F, Tambour Y, Seinfeld J H. Sectional representations for simulation aerosols dynamics. *Jour of Colloid and Interface Science*, 1980, **76**: 541 ~ 556.
- 12 Seigneur C, Pai P, Hopke P K, et al. Modeling atmospheric particulate matter. *Environmental Science & Technology*, 1999, **33**: 80A ~ 86A.
- 13 Wexler A S, Seinfeld J H. The distribution of ammonium salts among a size and composition dispersed aerosol. *Atmos Environ*, 1990, **24A**: 1231 ~ 1246.
- 14 Quinn P K, Asher W E, Charlson R J. Equilibria of the marine multiphase ammonia system. *Jour Atmos Chem*, 1992, **14**: 11 ~ 30.
- 15 Wexler A S, Seinfeld J H. Analysis of aerosol ammonium nitrate: departure from equilibrium during SCAQS. *Atmos Environ*, 1992, **26A**: 579 ~ 591.
- 16 Bassette M, Seinfeld J H. Atmospheric equilibrium model of sulfate and nitrate aerosols. *Atmos Environ*, 1983, **17**(11): 2237 ~ 2252.
- 17 Schwartz S E, Freiberg J E. Mass-transport limitation to the rate of reaction of gases in liquid droplets: Application to oxidation of SO<sub>2</sub> in aqueous solutions. *Atmos Environ*, 1981, **15**: 1129 ~ 1144.
- 18 Stelson A W, Friedlander S K, Seinfeld J H. A note on the equilibrium relationship between ammonia and nitric acid and particulate ammonium nitrate. *Atmos Environ*, 1979, **13**: 369 ~ 371.
- 19 Stelson A W, Seinfeld J H. Relative humidity and temperature dependence of the ammonium nitrate dissociation constant. *Atmos Environ*, 1982a, **16**: 983 ~ 992.
- 20 Stelson A W, Seinfeld J H. Relative humidity and pH dependence of the vapor pressure of the ammonium nitrate-nitric acid solutions at 25 °C. *Atmos Environ*, 1982b, **16**: 993 ~ 1000.
- 21 Tanner R L. An ambient experimental study of phase equilibrium in the atmospheric system: aerosols H<sup>+</sup>, NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, NH<sub>3</sub>(g), HNO<sub>3</sub>(g). *Atmos Environ*, 1983, **16**: 2935 ~ 2942.
- 22 Bassette M, Seinfeld J H. Atmospheric equilibrium model of sulfate and nitrate aerosols-II. Particle size analysis. *Atmos Environ*, 1984, **18**: 1163 ~ 1170.
- 23 Saxena P, Hudischewski A B, Seigneur C, et al. A comparative study of equilibrium approaches to the chemical charac-

- terization of secondary aerosols. *Atmos Environ*, 1986, **20**(7): 1471 ~ 1483.
- 24 Pilinis C, Seinfeld J H. Continued development of a general equilibrium model for inorganic multicomponent atmospheric aerosols. *Atmos Environ*, 1987, **21**: 2453 ~ 2466.
- 25 Saxena P, Muller P K, Kim Y P, et al. Coupling thermodynamic theory with measurements to characterize acidity of atmospheric particulate. *Aerosol Sci Technol*, 1993, **19**(3): 279.
- 26 Nenes A, Pandis S N, Pilinis C. Continued development and testing of new thermodynamic aerosol module for urban and regional air quality models. *Atmos Environ*, 1999, **33**: 1553 ~ 1560.
- 27 Kim Y P, Seinfeld J H, Saxena P. Atmospheric gas-aerosol equilibrium I: Thermodynamic model. *Aerosol Science and Technology*, 1993, **19**: 157 ~ 181.
- 28 Wexler A S, Seinfeld J H. Second-generation inorganic aerosol model. *Atmos Environ*, 1991, **25A**: 2731 ~ 2748.
- 29 Clegg S L, Brimblecombe P, Wexler A S. Thermodynamic model of the system  $H^+ - NH_4^+ - Na^+ - SO_4^{2-} - NO_3^- - Cl^- - H_2O$  at 298.15. *Journal Phys Chem*, 1998, **102**: 2155 ~ 2171.
- 30 Kim Y P, Seinfeld J H. Atmospheric gas-aerosol equilibrium III: Thermodynamics of crustal elements  $Ca^{2+}$ ,  $K^+$ , and  $Mg^{2+}$ . *Aerosol Science and Technology*, 1995, **22**: 93 ~ 110.
- 31 Meng Z, Seinfeld J H, Saxena P, et al. Atmospheric gas-aerosol equilibrium IV: Thermodynamics of carbonates. *Aerosol Science and Technology*, 1995, **23**: 131 ~ 154.
- 32 Jacobson M Z, Tabazadeh A, Turco R P. Simulating equilibrium within aerosols and nonequilibrium between gases and aerosols. *JGR*, 1996, **101**: 9079 ~ 9091.
- 33 Jacobson M Z. Studying the effects of calcium and magnesium on size-distributed nitrate and ammonium with EQUISOLV II. *Atmos Environ*, 1999, **33**: 3635 ~ 3649.
- 34 Ansari A S, Pandis S N. Prediction of multicomponent inorganic atmospheric aerosol behavior. *Atmos Environ*, 1999, **33**: 745 ~ 757.
- 35 Pilinis C. Modeling atmospheric aerosols using thermodynamic arguments—a review. *Global Nest: the INT. J.*, 1999, **1**(1): 5 ~ 13.
- 36 Bromely L A. Thermodynamic properties of strong electrolytes in aqueous solutions. *AIChE J*, 1973, **19**: 313 ~ 320.
- 37 Kusik C L, Meissner H P. Electrolytic activity coefficients in inorganic processing. *AIChE Symp Ser*, 1978, **173**: 14 ~ 20.
- 38 Pitzer K S. Theoretical considerations of solubility with emphasis on mixed aqueous electrolytes. *Pure Appl Chem*, 1986, **58**: 1599 ~ 1610.
- 39 Stokes R H, Robinson R A. Interactions in aqueous non-electrolyte solutions: I. Solute-solvent equilibria. *J Phys Chem*, 1966, **70**: 2126 ~ 2130.
- 40 Tang I N, Munkelwitz H R, Davis J G. Aerosol growth studies-II. Preparation and growth measurements of monodisperse salt aerosol. *Journal of Aerosol Science*, 1977, **8**: 149 ~ 159.
- 41 Winkler P. The growth of atmospheric aerosol particles with relative humidity. *Physica Scripta*, 1986, **37**: 223 ~ 230.
- 42 Zhang Y, Seigneur C, Seinfeld J H, et al. A comparative review of inorganic aerosol thermodynamic equilibrium modules: similarities, differences, and their likely causes. *Atmos Environ*, 2000, **34**: 117 ~ 137.
- 43 Hildebrand L M, Russell A G, Cass G R. Ammonia and nitric acid concentrations in equilibrium with atmospheric aerosols: experiment vs. Theory. *Atmospheric Environment*, 1984, **9**: 1737 ~ 1750.
- 44 Meng Z, Seinfeld J H. Time scales to achieve atmospheric gas-aerosol equilibrium for volatile species. *Atmos Environ*, 1996, **30**: 2889 ~ 2900.
- 45 Russell A G, McRae G J, Cass G R. Mathematical modeling of the formation and transport of ammonium nitrate aerosol. *Atmos Environ*, 1983, **17**: 949 ~ 964.
- 46 Russell A G, McRae G J, Cass G R. The dynamics of nitric acid production and the fate of nitrogen oxides. *Atmos Environ*, 1985, **19**: 893 ~ 903.

- 47 Russell A G, Cass G R. Verification of a mathematical model for aerosol nitrate and nitric acid formation and its use for control measure evaluation. *Atmos Environ*, 1986, **20**: 2011 ~ 2025.
- 48 Pandis S N, Harley R A, Cass G R, et al. Secondary organic aerosol formation and transport. *Atmos Environ*, 1992, **26A**: 2269 ~ 2282.
- 49 Pilinis C, Seinfeld J H. Development and evaluation of an Eulerian photochemical gas-aerosol model. *Atmos Environ*, 1988, **22**: 1985 ~ 2001.
- 50 McRae G J, Seinfeld J H. Development of a Second-Generation Mathematical Model for urban air pollution II. Evaluation of model performance. *Atmos Environ*, 1983, **17**: 501 ~ 522.
- 51 Meng Z, Dabdub D, Seinfeld J H. Size-resolved and chemically resolved model of atmospheric aerosol dynamics. *J G R*, 1998, **103**(D3): 3419 ~ 3435.
- 52 Harley R A, Russell A G, McRae G J, et al. Continued development of a photochemical model and application to the Southern California Air Quality Study(SCAQS) intensive monitoring periods: Phase I. Report to the coordinating research council under Project SCAQS-8. Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, and California Institute of Technology, Pasadena, CA, 1992.
- 53 Toon O B, Turco R P, Westphal D, et al. A multidimensional model for aerosols: Description of computational analogs. *J Atmos Sci*, 1988, **45**: 2123 ~ 2143.
- 54 Westphal D, Toon O B, Charson T N. A case study of mobilization and transport of Saharan dust. *J Atmos Sci*, 1988, **45**: 2145 ~ 2175.
- 55 Kotz A, Memmesheimer M, Ebel A, et al. Modeling of the aerosol phase in the European Regional Acid Deposition Model (EURAD). In: EUROTRAC Workshop on Regional and Global Modeling of Minor Atmospheric Constituents. XVI General Assembly, Eur. Geophys. Soc., Wiesbaden, Germany, April 23 ~ 26, 1991.
- 56 Middleton P B. Denver Air Quality Modeling Study (DAQMS). In: Twelfth Annual Meeting, AM. Assoc. for Aerosol Res., Oak Brook, Ill, Oct. 11 ~ 15, 1993.
- 57 Binkowski F S, Shankar U. The regional particulate matter model I: Model description and preliminary results. *J G R*, 1995, **100**(D12): 26191 ~ 26209.
- 58 Whitby K T. The physical characteristics of sulfur aerosols. *Atmos Environ*, 1978, **12**: 135 ~ 159.
- 59 Ackermann I J, Hass H, Memmesheimer M, et al. Modal aerosol dynamics model for Europe: Development and first applications. *Atmos Environ*, 1998, **32**(17): 2981 ~ 2999.
- 60 Wexler A S, Lurman F W, Seinfeld J H. Modeling urban and regional aerosols, I: Model development. *Atmos Environ*, 1994, **28**: 531 ~ 546.
- 61 Gery M W, Whitten G Z, Killus J P, et al. User's guide for the urban airshed model. Volume I: User's manual for UAM (CB-IV), SYSAPP-90/018a, final report prepared for the South Coast Air Quality Management District for Contract Number 89112A, 1989.
- 62 Lurman F W, Wexler A S, Pandis S N, et al. Modeling urban and regional aerosol-II: Application to California's south coast air basin. *Atmos Environ*, 1997, **31**: 2695 ~ 2715.
- 63 Jacobson M Z, Turco R P, Jensen E J, et al. Modeling coagulation among particles of different composition and size. *Atmos Environ*, 1994, **28A**: 1327 ~ 1338.
- 64 Jacobson M Z, Turco R P. Simulation condensational growth, evaporation, and coagulation of aerosols using a combined moving stationary size grid. *Aerosol Sci Technol*, 1995, **22**: 73 ~ 92.
- 65 Jacobson M Z. Development and application of a new air pollution modeling system—II: Aerosol module structure and design. *Atmos Environ*, 1997, **31**(2): 131 ~ 144.
- 66 Yu F, Turco R P. Contrail formation and impacts on aerosol properties in aircraft plumes: Effects of fuel sulfur content. *G R L*, 1998a, **25**: 313 ~ 316.
- 67 Yu F, Turco R P. The formation and evolution of aerosols in stratospheric aircraft plumes: Numerical simulations and comparisons with observations. *J G R*, 1998b, **103**: 25915 ~ 25934.

- 68 Russell A, Dennis R. NARSTO critical review of photochemical models and modeling. *Atmos Environ*, 2000, **34**: 2283 ~ 2324.
- 69 Chang J S, Jin S, Li Y, et al. The SARMAP Air Quality Model, Final Report, Air Resources Board. California Environmental Protection Agency, Sacramento, CA, 1997a.
- 70 Kumar N, Odman M T, Russell A G. Multiscale air quality modeling: application to Southern California. *J G R*, 1994, **99**: 5385 ~ 5397.
- 71 Byun D W, Ching J K S. Science algorithms of the EPA Model3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modeling system. EPA Report No. EPA-600/R-99/030, Office of Research and Development, U.S EPA, Washington D. C., 1999.
- 72 赵春生, 秦瑜. 海洋大气边界层中大气气溶胶产生和发展的数值模拟. 见: 周秀骥主编. 中国地区大气臭氧变化及其对气候环境的影响(二). 北京: 气象出版社, 1997. 215 ~ 224.
- 73 黄美元, 王自发. 东亚地区黄沙长距离输送模式设计. *大气科学*, 1998, **22**(4): 625 ~ 637.
- 74 Atkinson R, Baulch D L, Cox R A, et al. Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry. Supplement IV. *J Phys Chem Ref Data*, 1992, **21**: 1125 ~ 1571.
- 75 De more W B, Sanders S P, Golden D M, et al. Chemical kinetic and photochemical data for use in stratospheric modeling. Evaluation number 9, Rep 90-1, Jet Propul. Lab, Pasadena, California, 1990.
- 76 Gery M W, Whitten G Z, Killus J P, et al. A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling. *J G R*, 1989, **94**: 12925 ~ 12956.
- 77 Harley R A, Russell A F, McRae G J, et al. Photochemical modeling of the southern California Air Quality Study. *Environ Sci Technol*, 1993, **27**: 378 ~ 388.
- 78 Xu J, Bergin M H, Yu X, et al. Measurement of aerosol chemical, physical and radiative properties in the Yangtze Delta region of China. *Atmos Environ*, 2002, **36**: 161 ~ 173.

## A REVIEW OF THE CURRENT DEVELOPMENT OF ATMOSPHERIC AEROSOL MODELS

Yan Peng<sup>1)2)</sup> Li Weiliang<sup>2)</sup> Qin Yu<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> (Peking University, Depart. of Atmos. Sci., Beijing 100871)

<sup>2)</sup> (Chinese Academy of Meteorological Science, Beijing 100081)

### Abstract

The development and utilizations of atmospheric aerosol models are briefly reviewed. The characteristics of some currently used gas-aerosol thermodynamic equilibrium models and the more complicated integrated dynamics-chemistry models are described, which are suitable for urban and regional air quality assessment. Also the complexity in developing a comprehensive dynamic-chemistry aerosol model are discussed, and some aspects for model development and improvement are indicated, which include the mechanism of organic aerosol formation and transformation, aerosol formation and transformation under cloudy or foggy conditions, and the coupling of complicated aerosol physical-chemical model with regional or global models.

**Key words:** Atmospheric aerosol model Air quality assessment Model development and improvement