

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

大氣中含氯有機物及芳香族碳氫化合物光化學反應之研究(第二年計畫)：大氣氣膠模式之建立

Photochemistry of Chlorinated Hydrocarbons and Aromatics II : Aerosol Module

計畫編號：NSC 88-2211-E-002-016

執行期限：87年8月1日至88年7月31日

主持人：鄭福田 國立台灣大學環境工程學研究所

一、中文摘要

本研究計畫第一年的研究中發現，一個完整的空氣品質模式不但要考慮氣相部份，液相及氣膠相部份亦不容忽視，也就是一個完整的大氣化學模式必須能夠描述包括氣相、液相與氣膠相三個部份的物理化學變化。在第二年的研究中希望能將加強氣膠相部份的模擬能力，以期了解有機物在大氣的氣相與氣膠相間的相互關連及作用，並進一步以模式模擬其在一般大氣中的傳輸與分布狀況。

關鍵詞：台灣空氣品質模式、氣膠模式

Abstract

In order to predict concentration level of atmospheric Chlorinated species by air quality model, an aerosol model is necessary to be involved. We constructed an aerosol model for 2nd year's research.

This aerosol model will be incorporated into "Taiwan Air Quality Model" (TAQM) to improve its capability in predicting Chlorinated hydrocarbons. TAQM is the most advanced, comprehensive air quality model. It provides a basic framework for prediction of Chlorine related species atmospheric concentration. The comprehensive nature of the adapted model and its ability to calculate interscale to local scales

from larger regional scales) will make it practical tool in policy development and management.

Keywords: TAQM, Aerosol Model, chlorine

二、緣由與目的

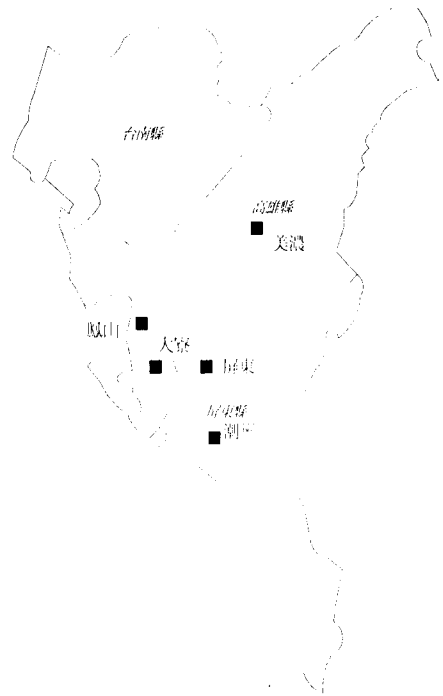
大氣中的含氯物質由於揮發性較低，常會出現在大氣的懸浮氣膠中，為了要探討含氯物質在大氣中的分布狀況，有必要進行大氣氣膠的探討。事實上，大氣中空氣污染物與大氣氣膠之間的關係已經愈來愈受重視。大氣中的氣膠，也就是一般所謂的懸浮微粒，不但會影響環境空氣品質，亦對人體健康造成威脅；一些次微米的微粒可經由人體的呼吸道進入人體而對人體健康造成影響。此外，次微米的微粒對光線亦具散射與吸收的效果，不但直接影響視線，亦會間接影響地球接受日光照射的能量收支平衡；可見大氣氣膠影響環境及人體健康至鉅。

關於大氣氣膠的調查研究，國內外都持續有人在進行，而有關大氣氣膠模式的研究，直到近幾年才開始有較深入的探討。以往受限於氣膠基本資料的缺乏，氣膠模式多只探討微粒物質從排放到沉降簡單的傳輸擴散行為；隨著對大氣氣膠的物理化學行為的逐漸了解，國外現在已經有部份研究群開始進行能探討大氣氣膠物理轉換與化學反應行為的氣膠模式。這之中以加州理工學院 John H. Seinfeld 所領導的研究群在氣膠模式

的發展上最有成果，他們發展了包括無機氣膠、有機氣膠與衍生性有機氣膠等氣膠模式相關理論與模式；Francis S. Binkowski 在無機氣膠模式也有相當不錯的成績；除此之外，Mark Z. Jacobson 也發展了一套氣膠模式，比較不同的是他的模式考慮了太陽輻射與氣膠能量吸收間的關係。

至於國內有關氣膠物理轉換與化學反應的研究雖有部份學者探討，但氣膠模式的發展則多停留在比較基本的輸送與擴散等理論上，比較深入的氣膠模式則付之闕如。一個完整的大氣氣膠模式至少包括氣膠化學 (aerosol chemistry)、氣膠動力學 (aerosol dynamics)、氣膠的結合 (aerosol coagulation)、凝結與蒸發 (condensation and evaporation)、成核與成長 (nucleation and growth)、排放與沉降 (emission and deposition) 等方面的模式。由於這樣的大氣氣膠模式必須與一個相當的大氣氣相化學模式結合在一起才有意義，而「台灣空氣品質模式」的大氣氣相化學模式正是一個最好的基礎，所以以「台灣空氣品質模式」為出發點來發展適當的氣膠模式是相當適切的，應可收事半功倍之效。

台灣地區空氣品質惡化的事件常常是因為懸浮微粒的關係，而大氣中懸浮微粒的來源除了污染源直接的排放外，衍生性的次微米氣膠 (secondary aerosol) 佔大氣氣膠相當重要的部份，所以發展一個能適當的描述台灣地區懸浮微粒物理化學行為的氣膠模式是相當重要的。本計畫將從相關的氣膠物理化學理論開始，吸取國外氣膠模式發展的相關經驗與理論，發展適合的大氣氣膠模式。並結合在「台灣空氣品質模式」之中，以探討台灣地區日益嚴重的懸浮微粒問題。



圖一、模擬區域與空氣品質監測站位置圖

三、結果與討論

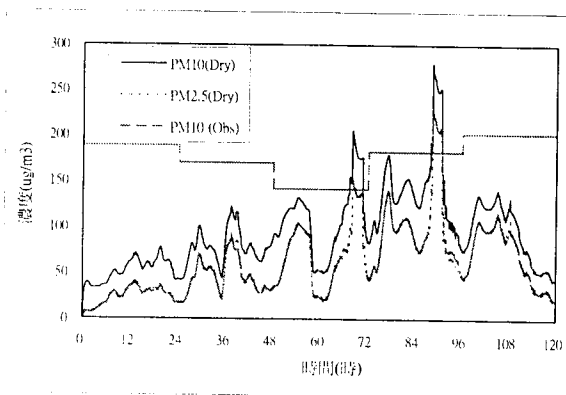
本研究選定屏東地區作為探討對象，如圖一所示，模擬之事件為民國 85 年 11 月 22 日至 26 日，模式所需之氣象資料是由 MIM5 模擬之。由於缺乏足夠的初始資料與邊界資料，本研究採用假設的初始條件，所有的氣膠物種濃度初始值皆設定為及小的數值，由圖二可看出，模擬開始時，所得的 PM_{2.5} 與 PM₁₀ 濃度皆很小，而與觀測值有較大的差距；至於邊界條件則以第一次模擬所得的結果，參考觀測站的觀測值而作等比例的調整，希望由此得到較符合實際狀況的邊界條件。環保署各測站如圖一所示。

1. 模式的基本驗證

本模式與 RPM 對相同的輸入參數條件做模擬結果的比較，結果顯示兩者的模擬結果完全相同，顯示模式的程式化過程無誤。

2. 模擬結果與觀測值比較

圖 2 為模擬結果與觀測值的比較，觀測值乃參考自環保署位於屏東的空氣品質監測站的監測結果，由於僅有 PM₁₀ 的日平均值，故僅對 PM₁₀ 的部份做比較。模



圖二、PM10 模擬值與觀測值比較

式共進行五天模擬時間的模擬，前兩天的模擬結果可視為模式的初始化階段，結果比較不具代表意義，後面三天的模擬結果則應該比較具有當地的特性，可視為正式的模擬結果。

由圖 2 可看出，模式前兩天的模擬結果與觀測值與觀測值差異相當大，由於模式此階段的模擬結果受初始條件影響相當大，故可預期模擬結果與觀測值差距會較大。接下來的第三、四兩天，初始濃度的影響已經不再，模擬結果也大致上皆在觀測值附近變化；第五天模擬結果則與模式誤差較大，由表 2 也可以看出相同的結果。

探究誤差的來源，由於氣象資料是來自於 MM5 模擬的氣象資料，而 MM5 對氣象狀況的模擬通常到第五天已經無法掌握實際的大氣狀況，而產生較大的偏差，進而影響對氣象參數很敏感的模擬結果。

此外，邊界條件的設定也影響模擬結果，根據本研究所進行的邊界條件敏感度分析，若假設邊界條件皆為無氣膠的情況，模擬結果相差最大的部份約為模擬最大值的 50%。由於缺乏詳盡的觀測結果作為驗證，目前僅能對本模式的模擬能力做如此的判斷，這些皆有待日後能有更詳盡的觀測資料來提供更為周詳的判斷。

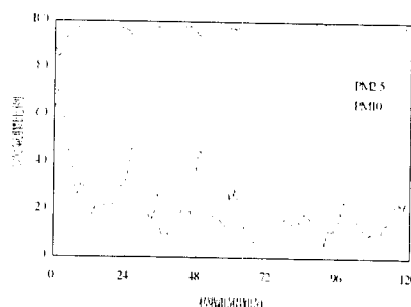
表 2. PM10 模擬結果與觀測值的比較

時間	觀測值	模擬值
第一天	188.51	50.6
第二天	169.35	76.36
第三天	141.29	107.29
第四天	182.18	141.67
第五天	202.57	93.31

3. 二次氣膠所佔比例

圖 3 為模擬結果所顯示的二次氣膠所佔的比例，對 PM2.5 來說，二次氣膠幾乎為構成細微氣膠的主體，由此可見對細微的氣膠來說，由氣態物質成核、凝結所成的工次氣膠為最主要的來源。對 PM10 來說，二次氣膠的比例就小很多，約在百分之二十五左右，此數據也與吳（1998）的觀測結果相呼應。

本研究已初步完成氣膠模式的建置，模式的模擬結果也做了初步的檢查，至於詳細驗證工作，則有待加強，目前已有「南高屏總量管制計畫」進行大規模的空氣品質觀測工作，應能提供詳盡的資料作為本模式的驗證比較之用。此外本研究亦初步完成與「台灣空氣品質模式」的大氣氣相化學模式部份連結，日後將能進行區域性的空氣品質模擬，對台灣的懸浮微粒研究提供更為整體、更為深入的資料。



圖三、二次氣膠佔 PM 比例之模擬結果

四、計畫成果自評

對於第二年的研究目標中，本研究主要將建立了一個有關氣膠的大氣物理化學的數值模式，對於如硫酸、硝酸、與氨等重要的無機物在氣液間的分布，已遵循重要的物理化學定律與熱力學定律加以解析，對於有機物形成氣膠相的物理化學過程，也遵循重要文獻的實驗結果加以引用並模式化，目前模式已可解析大氣氣膠有關粒徑分布的資料以及相關的各種重要無機物與有機物在氣膠相的化學濃度，除此之外，所建立的大氣氣膠模式也與目前的「台灣空氣品質模式」相鏈結，基本上已經達成目標與任務。

參考文獻

- [1] Binkowski, F. S. and Shankar, U., "The regional particulate matter model I. Model description and preliminary results.", *Journal of Geophysical Research*, Vol. 100, No. D12, pp.26191-26209 (1995)。
- [2] Chang, J. S., Binkowski, F. S., Seaman, N. L., Byun, D. W., McHenry, J. N., Samaan, P. J., Stockwell, W. R., Walcek, C. L., Madronich, S., Middleton, P. B., Pleim, J.E., and Landsford, H. L., "The regional acid deposition model and engineering model", NAPAP SOS/T Report 4, in *National Acid Precipitation Assessment Program, Acidic Deposition: State of Science and Technology* (1990)。
- [3] Kerminim, V., and Wexler, A. S., Post-fog nucleation of H₂SO₄-H₂O particles in smog, *Atmos. Environ.*, Vol. 28, pp.2399-2406 (1992)
- [4] Seinfeld, John H., *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*, A Wiley-Interscience Publication (1998)
- [5] Lurmann, F. W.; Wexler, A. S.; Pandis, S. N.; Musarra, S.; Kumar, N.; Seinfeld, J. H.; "Modeling Urban and regional Aerosols - II. Application to California's South Coast Air Basin"; *Atmos. Environ.*, Vol. 31, No. 17, pp.2695 (1997)
- [6] Jacobson, Mark Z.; "Development and Application of a New Air Pollution Modeling System - Part III. Aerosol-Phase simulations"; *Atmos. Environ.*, Vol. 31, No. 4, pp.587 (1997)
- [7] Jacobson, Mark Z.; Tabazadeh, Azadeh; Turco, Richard P.; "Simulating Equilibrium within Aerosols and Nonequilibrium between Gases and Aerosols"; *J. Geophys. Res.*, Vol. 101, No. D4, pp.9079 (1996)
- [8] Binkowski, Francis S.; Shankar, Uma; "The Regional Particulate Matter Model - I. Model Description and Preliminary Result"; *J. Geophys. Res.*, Vol. 100, No. D12, pp.26191 (1995)
- [9] Wexler, Anthony S.; Lurmann, Fredrick W.; Seinfeld, John H.; "Modeling Urban and Regional Aerosols - I. Model Development"; *Atmos. Environ.*, Vol. 28, No. 3, pp.531 (1994)
- [10] Harley, Robert A.; Cass, Glen R.; "Modeling the Concentration of Gas-Phase Toxic Organic Air Pollutants: Direct Emissions and Atmospheric Formation"; *Environ. Sci. Technol.*, Vol. 28, No. 1, pp. 88 (1994)
- [11] 袁中新, 「南高屏地區空氣污染總量管制規畫(子計畫 B1) PM_{2.5} 及 PM₁₀ 之濃度與組成特徵」, 行政院環保署 (1998)。
- [12] 張良輝, 「南高屏地區空氣污染總量管制規畫(子計畫 E4): TAQM 空氣污染事件之應用與解析」, 行政院環保署 (1999)。
- [13] 吳義林, 南高屏地區懸浮微粒分佈特徵與來源之研究, 311-317, 一九九八氣膠研討會論文集, 中華民國八十七年十月二日至三日, 屏東 (1998)。
- [14] 吳義林, 高屏地區大寮測站 PM₁₀ 與 PM_{2.5} 之組成份特徵研究, 339-346, 一九九八氣膠研討會論文集, 中華民國八十七年十月二日至三日, 屏東 (1998)。
- [15] 鄭福田;張時禹;張良輝 等; "台灣空氣品質模式之建立與應用"; 行政院環境保護署, EPA-83-E3F1-09-03-05 (1994)
- [16] 鄭福田;張時禹;張良輝;劉遵賢 等; "空氣污染物跨區域跨國輸送與酸雨形成關係之研究"; 行政院環境保護署, EPA-84-E3F1-09 (1995)