

气态 SO_2 转化及其数值模型研究

杨礼荣 任阵海 林子瑜 段 宁

(中国环境科学研究院, 北京 100012)

提 要

本文基于对室外烟雾箱实验, 探讨了 SO_2 的转化机制及影响 SO_2 转化的因素, 由此并借助于烟团模型, 建立了 SO_2 转化和硫酸盐气溶胶细粒子生成的数值模型, 用于估算从排放源排入大气的 SO_2 浓度及其转化成硫酸盐细粒子的浓度以及它们的空间分布, 与实测结果相比, 两者有较好的一致性. 同时指出, 由于大气中细粒子(粒径小于 $1\mu\text{m}$)可通过人体呼吸进入并沉积在肺泡中而对健康有不利影响, 从而说明研究大气中细粒子污染的迫切性.

关键词: SO_2 转化; 硫酸盐气溶胶; 数值模型.

一、引 言

二氧化硫排入大气后, 从源到汇在大气中将经历输送、扩散、转化和迁移等一系列理化过程. 大气固体颗粒物中的某些成分(如过渡金属、碳黑、 Pb_3O_4 、Al 等)以及空气中水分等都是促使二氧化硫转化的重要因素. 由于大气成分的多样性和复杂化, 加之其中包括了均相和非均相化学反应, 使转化过程也变得复杂. 根据 Eatough 等人^[1]观测, 二氧化硫烟羽通过一个雾带(fog bank)会使转化速率大大加快, 平均高达 $30\%/h$, 这说明大气中水分也对 SO_2 转化起明显的加速作用.

研究 SO_2 转化且使其参数化是在进行大气环境污染研究中所必须考虑的, SO_2 转化带来的硫酸盐气溶胶二次污染对允许排放量的控制是不可忽视的. 珠江三角洲地区航测和地面布点气溶胶观测均表明, 该地区细粒子(小于 $1\mu\text{m}$)气溶胶污染十分严重, 每年雨季出现的酸性降水均与该地区的二氧化硫转化密切相关. 所以弄清 SO_2 转化的化学机理, 并对实际大气中由转化而来的气溶胶粒子浓度进行估算, 将对区域性大气污染控制直至减少人体健康危害找到理论依据和对策. Carmichael 等人^[2]采用一系列化学方程, 曾作过详细全面的 SO_2 化学转化及输送模型的研究工作. 本文则利用烟雾箱实验的结论, 考虑影响 SO_2 转化的主要因素, 建立 SO_2 转化及其生成硫酸盐细粒子的数值模型, 从而提供一种计算因 SO_2 转化而生成硫酸盐细粒子浓度的简化方法.

二、 SO_2 的转化机制和实验结论

为探明珠江三角洲地区的细粒子气溶胶污染和产生酸性降水的原因, 为大气环境

1991年8月21日收到, 9月29日收到修改稿.

质量模型提供转化速率参数，我们分别于1987—1988年在广州市进行一系列现场烟雾箱实验，研究 SO_2 在实际大气条件下的转化速率及影响转化速率的因素。

1989年12月我们在广州市的不同功能区布点测定了大气气溶胶的粒子谱分布，观测结果表明，一天中无论哪个时段，在大气气溶胶中爱根核粒子占大多数，其含量在90%以上，同时航测表明该地区细粒子($1\mu\text{m}$ 以下)气溶胶污染严重。有鉴于此，我们在后面的模型计算时，考虑0.001— $1\mu\text{m}$ 的细粒子。这些细粒子的来源，除了部分来自排放源直接排放外，大部分来自气态污染物转化产生的二次气溶胶。下面我们通过室外烟雾箱的现场实验研究来阐述。

1. 实验方法及装置

实验装置采用Teflon薄膜制成体积 2m^3 的烟雾箱。在实验前先通入一定浓度(若干个ppm)的臭氧处理，以纯化聚四氟乙烯薄膜表面，然后用1—1.5ppm SO_2 进行24小时的表面处理，用净化空气稀释冲洗，并调至接近环境大气 SO_2 浓度(约几十个ppb至几百个ppb范围内)，在此条件下测定 SO_2 在薄膜壁上的衰减速率。实验装置见图1。图中空气净化塔是在测定太阳光强和进行 SO_2 壁衰减实验时净化空气用。气溶胶过滤器是在进行比较除去大气颗粒物对 SO_2 转化速率影响时使用。用KB-120无油泵将环境空气充入烟雾箱内，当进行不同初始浓度对转化速率影响时，用 SO_2 渗透管放入箱内调整其 SO_2 的起始浓度。在太阳光照射下测定不同时间箱内 SO_2 、 NO_x 、 NO_2 、 NO 、 O_3 、非甲烷总烃(NHMC)、凝结核气溶胶浓度和粒子谱的变化，同时测定太阳光强和相对湿度。 SO_2 和 NO_x 测定用法国ENV公司的AF20M型紫外荧光 SO_2 分析仪和AC-30型化学发光双道 $\text{NO}-\text{NO}_2-\text{NO}_x$ 分析仪， O_3 测定用美国TE公司49型紫外吸收式 O_3 分析仪，CNC浓度测定用美国TSI公司3020型凝结核气溶胶分析仪(可测粒径0.001— $1\mu\text{m}$)，NHMC用氢火焰气相色谱法测定，粒子谱分布测定用美国TSI公司3030型静电气溶胶分析仪(简称EAA)和日本PM-730型多道粒子分析仪。每轮实验反应结束后，用有机滤膜采样将反应后的颗粒物收集在滤膜上，用美国DIONEX 2120 I型离子色谱分析硫酸根等阴离子含量。扣除环境空气中硫酸根背景浓度是采用实验开始前采集环境空气颗粒物分析硫酸盐的含量的方法。

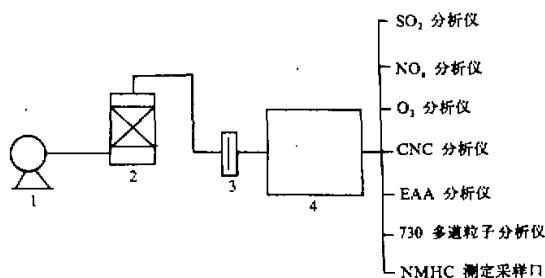


图1 室外烟雾箱实验装置

(1) KB-120无油泵，(2)空气净化塔，(3)气溶胶过滤器，(4)Teflon薄膜烟雾箱，(5)气体及气溶胶粒子分析仪

所有实验均采用广州市环境空气, 有些实验加入少量 SO_2 , 调整其起始浓度. 太阳光照射时间一直持续至 CNC 浓度和 O_3 浓度出现最大值之后, 约 5—6 小时.

2. 实验结果

从室外烟雾箱的实验, 我们除了得到箱内 SO_2 浓度随时间的变化, 还获得 NO_x 、 NO 、 N_2O 、 O_3 、CNC (凝结核) 的浓度随时间的变化. 在图 2 中, 我们给出相对湿度较大具有一定代表性的 1988 年 3 月 12 日的实验结果. 从图 2 看出, SO_2 浓度在太阳光

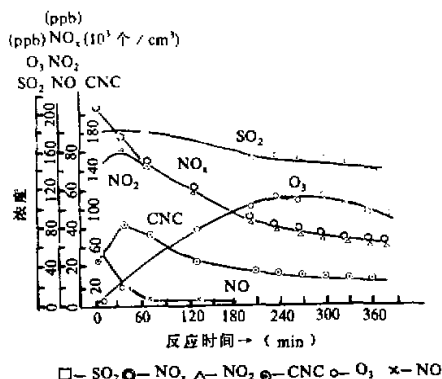


图 2 箱内 SO_2 、 NO_x 、 NO_2 、 NO 、 O_3 和 CNC 浓度随光照时间变化 (1988 年 3 月 12 日)

在光照反应开始后取前 3 小时箱内 SO_2 浓度衰减速率, 得到其最大转化速率, 以

$$\left(-\frac{d[\text{SO}_2]}{dt} \right)_{\max} \text{ 表示, 用 } \left(-\frac{d[\text{SO}_2]}{dt} \right)_{\max} \text{ 与 } \text{SO}_2 \text{ 起始浓度之比 } \left(-\frac{d[\text{SO}_2]}{[\text{SO}_2]dt} \right)_{\max}$$

表示单位初始浓度 SO_2 的转化速率. SO_2 转化的速率常数 R 是在假定 SO_2 衰减反应为准一级反应, 根据公式 $-\ln[\text{SO}_2] = Rt$ 作图由线性斜率获得.

(1) 影响 SO_2 转化速率的因素

实验结果表明, 影响 SO_2 转化速率的因素有 SO_2 起始浓度、相对湿度、太阳光强和环境空气中颗粒物等, 其中前三种因素是影响 SO_2 转化速率的重要因素. 从图 3 中看出, SO_2 浓度的衰减速率随 SO_2 的起始浓度增加而增加, 在本实验浓度范围内呈线性关系, 此结果与研究太原火电厂烟羽中 SO_2 转化速率^[3]相符, 在烟羽中 SO_2 浓度高, 转化速率大.

为了研究太阳光强对 SO_2 转化速率的影响, 我们在相对湿度近似相同的情况下进行了不同太阳光强的一组实验, 每次实验用平行的另一个小箱测定 SO_2 的光解常数 K_1 值, 用 $K_1[\text{NO}_2]$ 表示太阳光强, 图 4 给出了太阳光强对 SO_2 转化速率的影响, 从图看出,

照射后随时间一直下降, 根据其下降速度可计算 SO_2 转化速率. 随着 SO_2 的转化, 将不断产生硫酸盐凝结核气溶胶, 使箱内 CNC 浓度逐渐升高, 很快达最大值. 由于凝结核粒子之间的碰并和在箱壁上的附着, CNC 在到达最大浓度值后随即开始下降. 另外, 从图中看出, 在有碳氢化合物存在下, 太阳光照射开始的一段时间, 箱内 NO 转化成 NO_2 , 此时 NO_x 浓度下降很慢, 随着 NO 大量变成 NO_2 后, NO_2 浓度下降变得缓慢, 与此同时, NO_x 浓度几乎成线性降低, 根据 NO_x 浓度的下降速度, 可计算氮氧化物的转化速率.

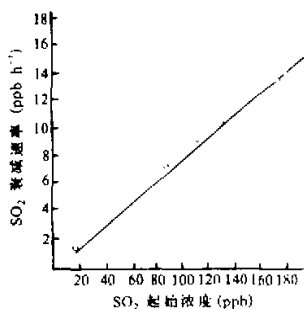


图 3 SO_2 起始浓度对其衰减速率的影响

太阳光强越强，SO₂转化速率越快。这是因为太阳光强有利于光化学氧化剂的产生，能促使SO₂的均相氧化反应。

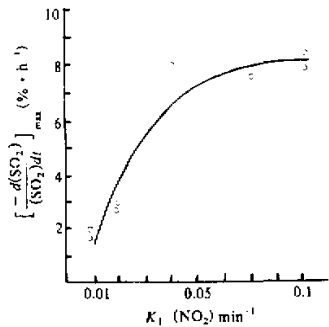


图4 太阳光强对SO₂转化速率的影响

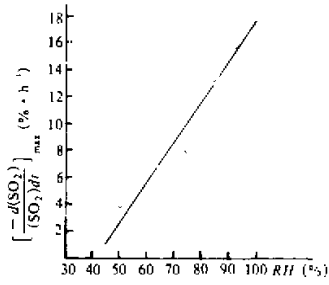


图5 相对湿度(RH)对SO₂转化速率的影响

湿度对SO₂转化起着重要作用。图5给出了相对湿度对SO₂转化速率的影响，从图中看出，SO₂转化速率随环境空气湿度增加而增大，并呈线性相关。大气湿度增加，有利于空气中SO₂在液滴表面上的吸收，产生多相化学反应，此结果与Wilson等人^[4]的研究工作相一致。珠江三角洲地区气候潮湿，太阳光照强，有利于SO₂转化，这对于三角洲地区在雨季出现酸沉降起着重要作用，也是该地区细粒子气溶胶污染的一个重要来源。

空气中颗粒物含有大量碳黑和一些过渡金属元素，对SO₂产生强烈吸附和催化作用。实验结果表明，存在颗粒物的SO₂转化速率大于除去颗粒物时转化速率。此结果与太原电厂烟羽含有大量颗粒物的SO₂转化速率比较高的结果相一致^[3,5]。

(2) SO₂转化成硫酸盐气溶胶及其粒子谱分布

从烟雾箱实验可观测到，在太阳光的照射下，箱内SO₂浓度随时间递减而凝结核

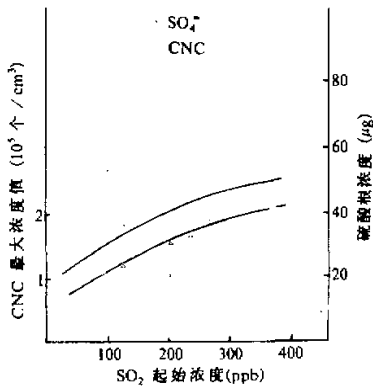


图6 SO₄²⁻浓度、CNC最大浓度与SO₂起始浓度的关系

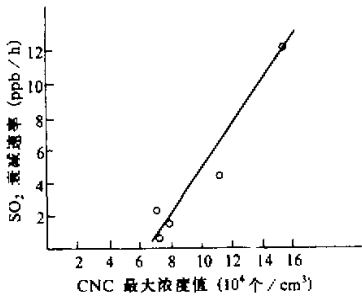


图7 SO₂的衰减速率与CNC最大浓度的关系

(粒径小于 $1\mu\text{m}$) 气溶胶不断增加, 硫酸根浓度也同时增加, 见图 6, 且 SO_2 衰减速率与 CNC 最大浓度值之间呈线性相关, SO_2 衰减速率越大, 转化产生的 CNC 最大浓度值也越大(图 7). 根据以上实验结果可以看出, 大气中 SO_2 在一定条件下向生成硫酸或硫酸盐气溶胶的方向转化. 同时, 由图 2 可知, 氮氧化物随时间其浓度降低, 也发生转化, 但从烟雾箱内反应后用滤膜采集下来的颗粒物, 用离子色谱分析其成分, 主要是 SO_4^{2-} (SO_4^{2-} 与 NO_3^- 之比约为 8:1), 可见细粒子气溶胶的成分以 SO_4^{2-} 为主.

通过观测箱内 SO_2 转化形成不同大小粒子气溶胶的粒子谱分布, 发现在转化的初期过程, 由气态污染物转化生成大量凝结核气溶胶, 使 CNC 浓度迅速上升, 很快达到最高值. 随着反应的进行, SO_2 浓度逐渐下降, 转化速率降低, 凝结核粒子生成速率下降. 箱内粒子碰并凝聚起主要作用, CNC 浓度随反应时间的增加而逐渐降低. 实验发现转化初期过程 CNC 粒子最大生成速率随 SO_2 的浓度、转化速率增加而相应增加.

由于烟雾箱内 SO_2 转化和产生的粒子碰并凝聚, 使粒径大于 $0.3\mu\text{m}$ 的气溶胶粒子数浓度随反应时间逐渐升高, $0.3\mu\text{m}$ 的粒子约占 $0.3-10\mu\text{m}$ 粒子总数的 50%. 根据 $0.3-10\mu\text{m}$ 粒子总数浓度随时间的增加速率, 可计算出其增长速率为 $16\%/h$, 此值与凝结核粒子的增长速率相比, 大于 $0.3\mu\text{m}$ 粒径粒子增长速率比凝结核粒子增长速率要慢. 可见, 由气态 SO_2 转化生成的凝结核粒子速度快, 而凝结核粒子碰并凝聚速率要小.

上述结果表明, 从气态 SO_2 转化成粒子气溶胶的过程, 首先由气态物质转变成凝结核粒子, 其增长速率快, 随后通过碰并, 凝结成大小不同粒径的粒子, 其粒子谱分布随反应时间逐渐变宽, 这种由转化产生的二次气溶胶粒子大部分属于细粒子, 其成分以 SO_4^{2-} 为主, 此结论与珠江三角洲地区的大气气溶胶粒子谱分布的航测和地面布点实测结论相一致. 另外, 在本实验条件下, 测得珠江三角洲地区 SO_2 转化速率常数在 $4.1\%-12.7\%/h$ 之间.

三、 SO_2 转化的数值模型

上面分析了不同条件下太阳光强、相对湿度、 SO_2 初始浓度等因素对 SO_2 转化速率的影响, 若综合地考虑这几个因素在内的所有可能对 SO_2 转化产生影响的因素作用, 那么可通过多元逐步线性回归, 拟合大气中 SO_2 气相转化表达式.

取 SO_2 平均转化速率 R' (ppb/h), 相对湿度 RH (%), 光强 I (kW/m^2), 光强对数 $\ln I$, SO_2 浓度 $[\text{SO}_2]$ (ppb), 对烟雾箱实验数据 (共 18 个样本) 进行回归分析, 得到回归方程如下:

$$R' = 0.175RH + 2.03\ln I + 0.0704[\text{SO}_2] - 2.35, \quad (1)$$

相关系数是 0.95.

由于影响 SO_2 转化的主要因子是 SO_2 起始浓度、光强、相对湿度, 由前面知道, 在反应初期, SO_2 浓度随时间递减而凝结核气溶胶数不断增加, 因此我们可以认为硫酸盐气溶胶粒子 (粒径小于 $1\mu\text{m}$) 生成速率亦主要与上述三个因素有关, 采用上面同样方法, 可得气溶胶生成率的回归方程

$$R_s = 0.161RH + 1.865 \ln I + 0.0403 [\text{SO}_2] - 2.477, \quad (2)$$

R_s 的单位是 $\%/h$, 其它符号意义同前. 这里相关系数是 0.92. 该式对 $0.3 - 1.0 \mu\text{m}$ 粒子较符合. 我们在图 2 中看到光照开始近 1 个小时内 CNC 浓度迅速上升 (不完全是由 SO_2 转化而来, 其中还包括 NO_x 、空气中已有的凝结核等), 而后逐渐减少, 但同时观测到粒径 $0.3 - 1.0 \mu\text{m}$ 的粒子随时间增加, 所以实际估算硫酸盐粒子浓度时, SO_2 进入空气后 1 小时内气溶胶生成率取实测统计值.

为了量化计算实际大气中 SO_2 转化浓度及气溶胶粒子生成浓度的空间分布, 我们建立了考虑层结反射和穿透作用的烟团模型, 并借助于该模型, 对珠江三角洲地区现有的和在建的火电站所产生的 SO_2 及其转化成硫酸盐气溶胶细粒子的浓度分布给出计算结果, 并预测未来规划建设的火电站对当地环境质量的影响.

根据在第 j 个时刻 $S(x_j, y_j)$ 点的污染源在某接收点 $R(x, y, z)$ 处所造成的浓度是所有 i 个烟团的浓度贡献之和, 考虑中心位于 (x_{ij}, y_{ij}, z_{ij}) 的烟团对 R 点的浓度贡献, 则有

$$c_i(x, y, z, t) = \frac{Q_s}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left[-\frac{(x-x_{ij})^2}{2\sigma_x^2} \right] \cdot \exp \left[-\frac{(y-y_{ij})^2}{2\sigma_y^2} \right] \cdot \exp \left[-\frac{(v_d + j\Delta t)^2}{2\sigma_z^2} \right] \cdot c_i,$$

其中, v_d 为污染物沉降速率, 取 0.5 cm/s , c_i 为垂直扩散项.

考虑到烟团对混合层的穿透作用及混合层对烟团的反射作用, 垂直扩散项 c_i 分为以下两种情况讨论:

(1) 当混合层高度 $z_i = 0$ 时 (即无混合层), 有

$$c_i = \exp \left[-\frac{(z-z_{ij})^2}{2\sigma_z^2} \right] + \exp \left[-\frac{(z+z_{ij})^2}{2\sigma_z^2} \right].$$

计算地面浓度时, $z=0$, 则有

$$c_i = \exp \left[-\frac{z_{ij}^2}{\sigma_z^2} \right].$$

(2) 当混合层高度 z_i 不为 0 时, c_i 则按所定义的烟气穿透率 $p = 1.5 - \frac{z_i - h_s}{\Delta h}$ 大小来分几种情况计算 c_i , 其中 h_s 为排放源几何高度, Δh 为烟气抬升高度.

(i) 当 $p=0$ 时, 认为污染物全在混合层内, 污染物在混合层与地面间多次反射, 按封闭型扩散式计算,

$$c_i = \sum_{n=-N}^N \exp \left[-\frac{(z_{ij} - 2nz_i)^2}{2\sigma_z^2} \right],$$

N 为反射次数.

(ii) 当 $p \geq 1$ 时, 认为污染物完全穿透混合层, 并在混合层以上的稳定层中扩散, 由混合层的阻挡面不能到达地面, 这时令 $c_i = 0$.

(iii) 当 $0 < p < 1$ 时, 即部分穿透情形, 这时有部分污染物抬升到混合层以上, 而 $(1-p)$ 部分被封闭在混合层以内, c_i 按下式计算,

$$c_i = c_{i1} + c_{i2}.$$

根据当地大气层结多为中性偏稳定结构, 我们设计成让穿透到混合层以上的烟团在 z_{ij} 高度 ($z_{ij} = h_i + \Delta h$) 向下扩散, 则有

$$c_{i1} = p \cdot \exp \left[-\frac{z_{ij}^2}{\sigma_z^2} \right],$$

而 $(1-p)$ 部分的烟团在 z_i 处按封闭型扩散,

$$c_{i2} = (1-p) \cdot \sum_{n=-N}^N \exp \left[-\frac{(z_{ij} - 2nz_i)^2}{2\sigma_z^2} \right].$$

由此可算得某一点某一时刻 SO_2 未转化的浓度.

根据 SO_2 转化率的分析, 我们建立如下方程:

$$\frac{d[\text{SO}_2]}{dt} = -R'. \quad (3)$$

将 (1) 代入 (3) 式, 由常微分方程的理论可获得上述方程的解析解.

对气溶胶而言,

$$\frac{dc_{spm}}{dt} = R_i \cdot c_{spm}. \quad (4)$$

将 (2) 式代入 (4) 式即可获得硫酸盐细粒子气溶胶浓度. 至此, 就建立起包括烟团模型在内的能够计算 SO_2 浓度和由 SO_2 转化来的硫酸盐气溶胶粒子浓度, 以及它们的时空分布的 SO_2 转化数值模型. 通过该模型, 我们计算了珠江三角洲地区火电站排放所形成的大气 SO_2 浓度和由其转化而来的硫酸盐气溶胶细粒子 ($1\mu\text{m}$ 以下) 数浓度.

我们利用冬夏两季的实测风场、光强、相对湿度以及现有的火力发电站排放源, 分别计算冬夏季的现状浓度日平均值, 并根据珠江三角洲地区未来发展, 计算加入规划源后, 该地区的大气环境状况, 分别计算了 SO_2 转化前和转化后的浓度及硫酸盐细粒子浓度分布. 从冬季和夏季计算结果看, SO_2 浓度和由此转化来的细粒子浓度, 冬季大于夏季. 但从飞机航测结果显示气溶胶粒子数夏季高于冬季, 这可能与飞机在烟流中观测有关, 且夏季光照强、湿度大. 而对于地面来说, 夏季对流混合起主要作用, 使 SO_2 及其转化来的气溶胶浓度低于冬季. 在这里, 我们给出模型计算所得的现状条件下冬季 SO_2 浓度分布和 SO_2 转化生成硫酸盐细粒子气溶胶的浓度分布, 分别见图 8—10. 总的结果是 SO_2 转化后其浓度明显低于不考虑转化的 SO_2 浓度. 在所给出的例子中, SO_2 污染浓度最高值分别为 0.1654 mg/m^3 (转化前) 和 0.0994 mg/m^3 (转化后); 气溶胶粒子浓度的高值区与未转化时的 SO_2 浓度高值区相对应, 其量级在 10^4 个 $/\text{cm}^3$, 和珠江三角洲航测结果相比, 由航测获得的地面上空 200m 处细粒子浓度量级最高是 10^5 个 $/\text{cm}^3$, 即计算值小于实测值, 这是因为我们仅计算火电站排放源 $1\mu\text{m}$ 以下硫酸盐粒子的生成, 且计算是在地面处, 而航测获得的细粒子包含了所有成分的气溶胶, 并且上空 200—300m 正是在火电站烟囱排放的烟羽中心所及的高程之内; 另一方面, 实际大气中存在许多粒子源, 有生活源、交通源以及沿海海上来的凝结核粒子源; 从气态

污染物向细粒子转化机制来说, 除了在较高湿度下 SO_2 多相转化生成硫酸盐气溶胶以及 SO_2 通过均相光化学反应转化外, 还有就是高温气体排放物因冷凝而生成细粒子气溶胶.

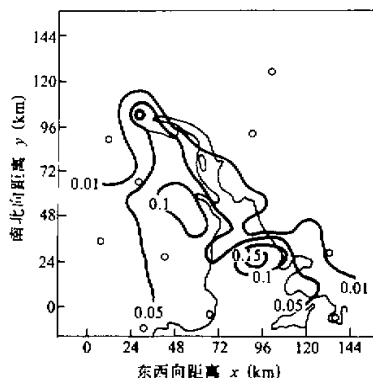


图8 SO_2 未转化情形 (单位: mg/m^3)

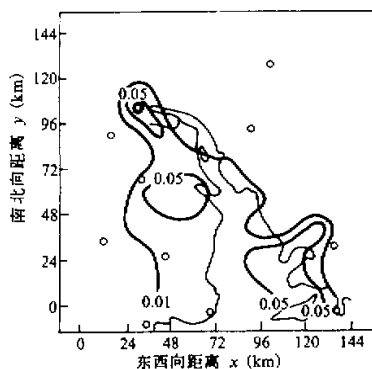


图9 SO_2 已转化情形 (单位: mg/m^3)

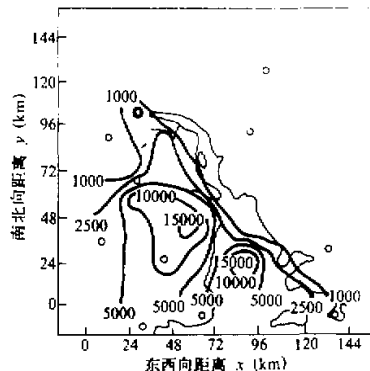


图10 气溶胶 (小于 $1\mu\text{m}$) 粒子数浓度分布 (单位: 个/ cm^3)

从上述所知, 由于 SO_2 在一定条件下发生转化, 所以火电站或其它源排放的 SO_2 , 随时间和距离的增大, 烟气中 SO_2 浓度愈来愈小 (这里也有大气湍流扩散的稀释作用), 而气溶胶粒子浓度会逐渐上升 (虽然干湿沉降、平流输送等使其有一定程度的降低), 这就是为什么许多地方实测 SO_2 浓度值并不高, 但病发率却上升的原因之一. 由于大气中小于 $1\mu\text{m}$ 的细粒子可通过呼吸穿透滞留在肺泡内, 因此对人体健康具有危害, 而从大气光学角度, 大气中粒径小于 $0.2\mu\text{m}$ 的粒子对能见度的影响很小, 往往给人以良好环境的错觉, 而忽视其对人体健康的危害, 所以在以后的环境影响研究中, 必须重视对气溶胶粒子浓度的监测和计算.

四、结 语

通过烟雾箱的 SO_2 转化实验表明, 在本实验条件下, 珠江三角洲地区 SO_2 转化速率常数在 4.1 — 12.7%/h 之间; SO_2 起始浓度、相对湿度和太阳光强是影响 SO_2 转化速率的主要因素; SO_2 转化形成硫酸盐气溶胶的过程, 开始生成凝结核粒子的增长速率快、随后碰并, 凝聚成不同粒径的粒子, 其粒子谱分布随反应过程逐渐变宽, 转化产生的二次气溶胶主要是细粒子, 其成分以 SO_4^{2-} 为主, 而转化初期凝结核气溶胶(粒径小于 $1\mu\text{m}$)粒子最大生成速率与 SO_2 浓度及其转化速率有关。据此, 我们通过建立区域性、中尺度范围的大气环境质量的烟团模型, 设计了计算气态 SO_2 转化及其所生成硫酸盐气溶胶细粒子的浓度时空分布数值模型, 在被用于珠江三角洲地区的火电站大气环境规划之中, 模型计算值和实测结果大致吻合, 从而检验了该模型的适用性。

借助于室外烟雾箱实验, 揭示了气态 SO_2 转化和大气中硫酸盐气溶胶粒子生成的密切相关性, 而 SO_2 转化的数值模拟, 则为估算从源排入大气的 SO_2 浓度和它转化生成的硫酸盐细粒子气溶胶浓度, 乃至其它颗粒物浓度及其时空分布提供了一种简便实用的方法。

参 考 文 献

- [1] Eatough D. J. et al., 1984, Rapid conversion of SO_2 to sulfate in a fog bank, *Environmental Science and Technology*, **18**(11), 855 — 859.
- [2] Carmichael G. R. et al., 1984, An Eulerian transport/transformation/removal model for SO_2 and sulfate — I. model development, *Atmospheric Environment*, **18**(5), 937 — 951.
- [3] 林子喻等, 1986, 航测火电厂烟羽中二氧化硫的转化率, *中国环境科学*, **6**(5), 18 — 20.
- [4] Wilson W. E. et al., 1970, A study of sulfur dioxide in photochemical smog I. effect of SO_2 and water vapor concentration in the 1-butene/ NO_x / SO_2 system, *Journal of Air Pollution Control Association*, **20**, 385 — 390.
- [5] Chun K. C. et al., 1973, Capacity of ferric oxide particles to oxidize sulfur dioxide in air, *Environmental Science and Technology*, **7**(6), 532 — 538.

A Study of Transformation for Gaseous SO_2 and Its Numerical Simulation

Yang Lirong, Ren Zhenhai, Lin Ziyu and Duan Ning

(Chinese Research Academy of Environmental Sciences, Beijing 100012)

Abstract

Based on outdoor smog chamber experiments, the transformation mechanism for SO_2 and sulfate and the factors which have influence on SO_2 transformation are described. A numerical model has been established which incorporates the puff model and the equations for SO_2 transformation and sulfate aerosol formed, and it is used to estimate regional distribution of sulfur dioxide and sulfate concentrations. The simulation results have shown consistent with the measurements from field monitoring. Because sulfate aerosol (particles diameters with smaller than $1\mu\text{m}$) could be deposited in the pulmonary alveoli by man's breath and present a greater health hazard than SO_2 , it is urgent to study smaller particles pollution.

Key words: Sulfur dioxide transformation; Sulfate aerosol; Numerical simulation.