稳态假设视角下的HO2自由基浓度反演

Steady-state-based imputation for HO2

首先，CMIP6合作团队约定共享CO的降解速率(lossco)，标准单位为mol m-3 s-1.

HO2的生成反应主要有两个：

**CO + OH + O2 → HO2 + CO2 (R1)**

**O3 + OH → HO2 + O2 (R2)**, *k*2 = 1.70×10–12×*e*(–940/T), preferred value as 7.3×10–14 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K.

其中R1的反应速率相当于CO的降解速率，也等于HO2的生成速率。

HO2的降解反应主要有三个：

**O3 + HO2 → 2O2 + OH (R3)**, , preferred value as 2.0×10–15 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K.

**NO + HO2 → NO2 + OH (R4)**, , preferred value as 8.5×10–12 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K.

**HO2 + HO2 + M → H2O2 + O2 + M (R5)**, *k*5 = 2.2×10–13×exp(600/T), preferred value as 1.6×10–12 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K.

所以我们可以得到：

L(CO) + *k*2 [O3][OH] = *k*3 [O3][HO2] + *k*4 [HO2][NO] + 2*k*5 [HO2]2

[HO2]浓度的解析解可以由求解一元二次方程得到：

2*k*5 [HO2]2 + (*k*3[O3] + *k*4[NO]) [HO2] – (L(CO) + *k*2 [O3][OH]) = 0

a = 2*k*5, b = *k*3[O3] + *k*4[NO], c = – (L(CO) + *k*2 [O3][OH]).

统一单位：

L(CO)mole = L(CO) × 6.022×1023×10-6 moleculecm-3 s-1

[NO]mole = [NO] ×1.01325×105/T×7.243×107×109 moleculecm-3

GISS-E2-1模型可能没有R5反应，所以计算过程可进行简化：

L(CO) + *k*2 [O3][OH] = *k*3 [O3][HO2] + *k*4 [HO2][NO]

得到：[HO2] = (L(CO) + *k*2[O3][OH])/(*k*3[O3] + *k*4[NO])