稳态假设视角下的OH自由基浓度反演

Steady-state-based imputation for OH

[OH]的浓度在CMIP6库中大多是已提供的，所以我们可以借助已知的[OH]，在稳态假设下反推[O(1D)]的浓度。

OH自由基的生成包括：

O(1D) + H2O → 2OH **(R1)**, *k*1 = 2.14×10-10 cm3 molecule-1 s-1

O3 + HO2 → 2O2 + OH **(R2)**, , preferred value as 2.0×10–15 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K

NO + HO2 → NO2 + OH **(R3)**, , preferred value as 8.5×10–12 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K.

OH自由基的消去反应包括：

**CO + OH + O2 → HO2 + CO2 (R4) (**lossco**)**

O3 + OH → O2 + HO2 (R5), , preferred value as 7.3×10–14 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K.

OH + NO2 + M → HNO3 + M (R6), *k*6 preferred value as 3.0×10–11 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K

**HO + HO** → **H2O + O** **(R7),** *k*7 = 6.2×10–14×(T/298)2.6×*e*(945/T), preferred value as 1.48×10–12 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K.

**HO + HO + M** → **H2O2 + M** **(R8),** *k*8 = 3.9×10–11×(T/300)-0.47

**HO + HO2** → **H2O + O2** **(R9),** *k*9 = 4.8×10–11×exp(250/T), preferred value as 1.1×10–10 cm3 molecule-1 s-1 at 298 K.

**HO + NO + M** → **HONO + M** **(R10),** *k*10 = 3.3×10–11×(T/300)-0.3

所以OH自由基的稳态为：

2*k*1[O(1D)][H2O]+ *k*2[O3][HO2]+ *k*3[NO][HO2] = L(CO)+ *k*5[O3][OH]+ *k*6[OH][NO2]+2(*k*7+ *k*8)[OH]2+ *k*9[OH][HO2]+ *k*10[OH][NO]

我们可以求解[O(1D)]，以一元一次方程的形式。

2*k*1[O(1D)][H2O] = L(CO)+ *k*5[O3][OH]+ *k*6[OH][NO2]+2(*k*7+ *k*8)[OH]2+ *k*9[OH][HO2]+ *k*10[OH][NO] – *k*2[O3][HO2] – *k*3[NO][HO2]