

PAMS 光化測站揮發性有機物之模擬與模式發展

陳聖博¹ 劉遵賢² 陳杜甫² 張時禹² 王家麟³

¹ 空軍氣象中心

² 國立中央大學大氣物理研究所

³ 國立中央大學化學系

摘要

本研究主要為發展一針對光化學評估測站(PAMS)的揮發性有機物(VOC)進行模擬之空氣品質模式(PAMS_AQM)。主要的模式架構是以三維區域性空氣品質模式(TAQM)為基礎，化學物種簡併機制(simplified lumped mechanisms)以 RADM2 為原則，由 PAMS 逐時觀測之 56 種 VOC，扣除原來模式中已經有個別模擬的乙烷(ethane)、乙烯(ethylene)和異戊二烯(isoprene)，針對其他 53 個 VOC 物種進行模擬。PAMS_AQM 的運算依附在 TAQM 每一步的運算之後，因此在 PAMS_AQM 中，物理傳輸的部份和 TAQM 相同，並依照個別 VOC 與簡併物種的比例來計算，化學機制的部份則使用 TAQM 每一步階所計算的 OH、NO₃ 及 O₃ 的濃度帶入 PAMS_AQM 中與個別 VOC 計算。模擬結果顯示 5/2~5/4 之風速較低且模擬結果較符合，個別 VOC 物種隨時間的演變與 PAMS 觀測時序有良好的一致性，證實了本模擬系統架構的設計已能描述每一物種的化學演變情形。配合原來的區域性空氣品質模式(TAQM)進行模擬，除了對臭氧與其前驅物的關係可以有更進一步地探討外，對於監測物種的新增、VOC 排放量的建立以及管制策略的研擬等皆可提供更多實質上之助益。

關鍵詞：臭氧前驅物、VOC、PAMS、TAQM

一、前言

臭氧(O₃)的形成與累積一直是都市發展與工商業繁榮的附屬產物。臭氧並非直接排放，而是由氮氧化物(NO_x)與揮發性有機物(VOC)經一連串光化學反應而形成(Houweling et al., 1998)。為了瞭解臭氧與其前驅物的複雜關係，臭氧的研究一直是在空氣品質方面歷久不衰的研究議題之一。本研究主要是以模式模擬為主軸，依據現有的 VOC 觀測技

術，革新過去模式中對於 VOC 模擬的方式，以期 VOC 的模式模擬可以和觀測做更進一步的結合與應用。

對於揮發性有機物而言，因為在大氣中的組成有上千種，而且每一種 VOC 對於臭氧的生成潛勢差異性大，故有必要針對 VOC 中各物種來做進一步的分析(李宗宜等，2004)。最早開始探討個別 VOC 之研究為 Atkinson 在 1989 年(Atkinson, 1989)與 1990 年

(Atkinson, 1990)開始量測個別物種之 VOC 的反應速率常數。Carter 從 1995 年(Carter et al., 1995)亦開始研究個別 VOC 物種之臭氧反應尺度(Ozone Reactivity Scales)，並針對個別物種進行環境箱(environmental chamber)實驗。而美國在 1990 年後，開始在高臭氧的都會地區進行「光化學評估監測測站(PAMS)」臭氧和其前驅物的觀測；台灣在 2001 年亦引進了美國 PAMS 的運作模式，並採用美國 Perkin Emler 的自動 VOC 分析系統作為光化學測站的基本觀測設施(王家麟等，2004)。光化學評估測站所測量的 VOC 達 56 種物質，這些為數眾多且濃度互異的 VOC 資料，有助於釐清污染源的種類，以及對臭氧生成的光化學原因能提供直接的證據(蔡政雄，2001)。

自從有了 PAMS 觀測資料後，許多學者便開始利用這些觀測資料探討 VOC 的個別差異以及其和臭氧的關係。Cardelino 在 1995 年即針對 PAMS 之 56 種 VOC 物質個別進行增量反應性(Relative Incremental Reactivity, RIR)之分析，並將 56 種 VOC 進行分類，進而探討人為源與自然源的 VOC 對於臭氧生成之貢獻(Cardelino et al., 1995)。Yang 在 2005 年(Yang et al., 2005)對台灣中部地區之 PAMS 光化評估測站連續監測資料進行分析，除了發現 VOC 物種逐日和季節之週期性變化，亦將所觀測到 VOC 分成液態石油洩漏、汽機車排放以及植物源排放。Lee 在 2006 年(Lee et al., 2006)更針對 isoprene 進行分

析，發現其季節性的差異以及和臭氧日變化之相關性。

一直到現在，藉由 PAMS 觀測資料的研究分析已經使得我們逐漸了解個別 VOC 的差異，但是在數值模擬的部份則鮮少針對每一個別物種進行分析；目前常使用且以理論為基礎之三維區域性空氣品質模式有 Community Multiscale Air Quality model (CMAQ)、Taiwan Air Quality Model (TAQM) 等模式(吳志強等，2005)。理論上要解析大氣化學的現象必須考量所有的反應物種與化學反應方程式，不過受限於計算時間與運算能力，因此目前在空氣品質模式中會採用化學物種簡併(simplified lumped mechanisms)的方式，將具有同類或同種反應特徵之大氣化學物種進行合併至可接受與計算之程度(張時禹等，2005)。使用這些化學簡併機制可以減少模擬資源的浪費及運算時間；但是相對地，對於個別 VOC 物種，這種方式就無法將模擬結果與 PAMS 等 VOC 觀測資料做比較詳盡的結合。

由上述的相關研究可知，雖然 PAMS 光化評估測站的連續觀測已經行之有年，但是在空氣品質模式發展方面，尚未有比較詳盡的模擬可以顯示出個別物種之差異，一直到最近才開始有對個別物種進行探討(Ginnebaugh et al., 2007)。本研究將以台灣空氣品質模式(TAQM)為基礎，針對 PAMS 個別揮發性有機物模擬進行設計，並考量模式運算效能，發展出一符合 PAMS 觀測物種之

空氣品質模式(PAMS_AQM)，並以 PAMS 觀測結果驗證模式模擬之正確性。

二、模式架構

本研究之 PAMS_AQM 空氣品質模式架構主要是以台灣空氣品質模式(TAQM)為依據，在進行每一步階的物理傳輸及化學過程運算時，TAQM 會先計算，再進行 PAMS_AQM 計算。PAMS_AQM 的物理傳輸和 TAQM 相同，個別 VOC 將依據其和簡併物種的比例來計算。化學的部份則將 TAQM 每一步階所算出的 OH、NO₃ 和 O₃ 濃度帶入 PAMS_AQM 中與個別 VOC 計算。圖 1 為 PAMS_AQM 之模式架構圖。

在物理模擬過程中，PAMS_AQM 增加的模組有下面五個部份：水平平流(HADVEC_PAMS)、垂直平流(VADVEC_PAMS)、水平擴散(HDIFF_PAMS)、垂直擴散(VDIFF_PAMS)和地表乾沈降(SFCCONC_PAMS)等；在化學模擬過程中，主要增加的有化學反應計算控制模組(CHEM_PAMS)和化學積分模組(CHEM_SOLVER_PAMS)等部份。以下分別針對物理及化學計算部份進行解說。

在物理計算的部份，由於在 TAQM 中有計算 VOC 的簡併物種濃度，因此在進行 PAMS_AQM 的模擬時，每一個 VOC 物種的運輸可依據其與 TAQM 中簡併物種的比例來計算。因此 PAMS_AQM 在物理計算的部份可視作與 TAQM 相同。

在化學的部份，為了要模擬 PAMS 的個別物種，首先必須先建立一個包含個別 VOC

物種的化學反應機制。依據 RADM2 有機化學機制，與 PAMS 揮發性有機物有關的簡併物種有 10 個，相關的化學反應動力式有 18 個，主要為簡併物種和 OH、NO₃ 和 O₃ 之反應。由於 RADM2 為一可描述大氣污染物演變的化學機制，因此可將此機制中與 PAMS 之 VOC 有關的化學反應式當作是 VOC 在大氣中的主要反應；接著可以將 PAMS 之 VOC 歸類於簡併物種中，以找出個別物種的主要化學反應式。PAMS 觀測之 VOC 有 56 種，扣除原本 RADM2 機制中已經獨立之乙烷(ethane)、乙烯(ethylene)和異戊二烯(isoprene)後，剩下之物種有 53 個，而每個 VOC 相對於 RADM2 的簡併物種情形如表 1 所示。

在初始條件和邊界條件部份，為了要給定 PAMS 的個別物種初值，在進行模式模擬時，將以排放量中個別物種與簡併物種中的比例，當作 PAMS_AQM 物種初始條件和邊界條件之比例，以便進行模擬。

為了驗證 PAMS_AQM 模式架構設計之正確性，本研究使用台灣中部地區環保署 PAMS 光化評估測站之連續監測資料比對模式模擬結果。

三、模擬案例

本研究主要是針對台灣中部地區之光化評估測站(崇倫站、草屯站、竹山站)進行模擬結果評估，模擬時間為 2003 年 5 月 2 日至 2003 年 5 月 7 日，為期 5 天。崇倫站為大台中地區典型的 VOC 排放測站，在光化學監測網中屬於臭氧前驅物濃度最高站；竹山站為

南投地區高臭氧常出現的觀測站之一，在光化學監測網中為最高臭氧濃度站；而草屯站為臭氧生成物與前驅物之間的中間傳輸站。三光化測站附近皆有環保署所設立之空氣品質監測站(忠明站、南投站、竹山站)。

台灣空氣品質模式(TAQM)為一巢狀網格(如圖 2 所示)，從最粗網格(D1, 81 km × 81 km)到最細網格(D4, 3 km × 3 km)涵蓋範圍從東南亞地區到台灣地區。氣象場資料為 MM5 的模擬結果。在 PAMS_AQM 部份，直接從最細網格(D4)開始進行模擬，每一步階 TAQM 運算結束後開始模擬 PAMS_AQM。由於本研究針對之 PAMS 光化測站 VOC 物種大多為人為源(Lee et al., 2006; Cardelino et al., 1995)，輸入 PAMS_AQM 之排放資料採用環保署委託中鼎所建立以 2003 年為基準年之台灣地區排放源資料庫(TEDS-6)產生 PAMS_AQM 模擬所必須之排放量相關資料。

四、結果與討論

1. TAQM 及 MM5 模擬結果與比較

在模擬結果驗證方面，首先以中部地區三個鄰近 PAMS 光化評估測站之空氣品質監測站的觀測資料時間序列圖為基礎，氣象場與 MM5 的模擬結果進行分析，化學場則與 TAQM 的模擬結果進行分析，見圖 3 所示。

氣象場的模擬主要是針對風速和風向與觀測資料比較，結果顯示在 5/2 至 5/4 這段時間風速較低(< 3m/s)，模擬結果較符合觀測趨勢，5/5 之後模擬風速較觀測值高，使得污染

物之模擬值降低。忠明站和竹山站的風向在白天與觀測值較符合，但是由於這段時間的風速值低，因此風向對於污染物的傳輸所造成的影響較小。

對於 O₃ 而言，5/2 至 5/4 之觀測值比 5/5 至 5/6 之觀測值高，不過尚未到達臭氧事件日之濃度 120ppb。中午臭氧的高值隨模擬時間遞減，可能是由於 5/4 後模擬之風速增加所導致。由觀測與模擬結果比較顯示 TAQM 模擬結果對於 O₃ 之濃度變化趨勢掌握良好，從夜間臭氧幾乎被滴定至接近零的濃度，到中午過後的臭氧高值，模式模擬結果與三個測站之觀測近乎一致。

NO_x 的模擬在忠明站和南投站的結果比竹山站來得好，惟在 5/3 夜間模擬值有高估的情況，竹山站在夜間至清晨的觀測有雙峰的現象，但在模擬結果上並未顯示出來，有可能是排放量推估或氣象場之誤差所導致；CO 的模擬在三個測站皆有低估的情況發生，特別是在 5/5 之後；不過這段時間由於氣象場模擬之風速較大，有可能會使得污染物的濃度造成偏差，但是基本上日夜的變化已能掌握。

2. PAMS_AQM 模擬結果與比較

在 RADM2 簡併物種中，與 PAMS 觀測 VOC 有關者有 10 類，由於 PAMS 物種較多，在此扣除乙烷(ETH)、乙烯(OL2)和異戊二烯(ISO)3 類，並依據 RADM2 簡併物種的分類，針對 PAMS 竹山站觀測中主要的 VOC 物種探討模擬結果。

圖 4~圖 10 為 PAMS 竹山站針對 RADM2 進行分類之觀測與模擬結果比較。由於 PAMS 所觀測之 VOC 主要為人為污染源，因此在上午 8 時前與下午下班時間後 VOC 濃度皆上昇，大部分的物種觀測在上午 8 時前會有雙峰的情況，可能是由於大氣混合層上昇、光化反應開始以及排放量增加之結果，此現象在反應性較高之烯類 VOC 物種最為明顯(見圖 7~圖 8)。

個別物種之時序圖可以顯示出模擬結果已經有掌握到日夜濃度之變化；中午左右為光化反應最強之時段，再者白天之大氣混合層高度較晚上高，所以白天 VOC 濃度在中午左右接近低值；夜間雖然人為排放量減少，但是由於夜間大氣混合層高度較低，因此 VOC 濃度值在夜間有上昇之趨勢。

5/2~5/4 由於風速較低，因此夜間 VOC 物種之濃度值較 5/5 之後來得高，白天中午左右之 VOC 濃度仍然會受到光化反應及混合層高度之影響。整體看來 5/2~5/4 之模擬結果較好，顯示 PAMS_AQM 已經可以模擬出個別 VOC 物種的表現。

五、結論與建議

1. 本研究主要為發展一針對 PAMS 光化評估測站量身訂做之空氣品質模式(PAMS_AQM)；即以 TAQM 模式為基礎，針對過去模式無法解析的 53 個 VOC 物種進行模擬設計。吾等已可藉由此模式計算 VOC 物種之逐時濃度改變。研究成果顯示 5/2~5/4 由於風速較低(風速 < 3m/s)，且氣象場的誤

差較小，VOC 個別物種之時序觀測結果已經可以表現在模式模擬結果上。5/5 之後由於模擬風速較觀測值高，因此 VOC 模擬結果誤差較大。

2. 由本研究所發展出可模擬 VOC 物種之 PAMS_AQM 模式，搭配在 TAQM 模式中，可以針對 PAMS 光化評估測站所觀測之 VOC 物種進行時空模擬分析，解決了長久以來使用化學簡併機制的空氣品質模式不足以驗證 PAMS 觀測結果之問題。藉由 PAMS 觀測與模式模擬之配合，除了可以了解每個 VOC 物種之物化特性外，其與 O₃ 之關係，亦可由 VOC、NO_x 和 O₃ 的資料解析獲得。再者，搭配 PAMS 觀測與模式模擬亦可用來分析模式中 VOC 排放源資料庫之正確性，以及相關 VOC 光化指標之研究。在臭氧的管制策略方面，由於 PAMS_AQM 可對個別物種進行模擬，對於 VOC 的臭氧產生潛勢 (Incremental Reactivity; IR)，以及 EKMA (empirical kinetic modeling approach)(Milford et al., 1994)等分析，亦可利用上述之方法分析個別 VOC 物種之臭氧生成潛勢以及不同 NO_x 條件下對於臭氧的影響。
3. 基於本研究之理論架構，除了可以模擬現階段 PAMS 光化評估測站可量測之 VOC 物種，對於目前沒有進行觀測的 VOC 物種，如果未來想要進行觀測，亦可先使用此模式來進行分析與評估。譬如可對光化反應性高之醛酮類物種進行模擬設計等等。

4. 本研究目前所架構之 PAMS_AQM 主要是依附在 TAQM 之下，因此目前主要的物理運算皆與現階段之 TAQM 相同。未來可將 VOC 物種之物理傳輸獨立計算，模擬結果應更為準確，但勢必會增加模式模擬運算時間，因此需要對此項目再做分析與評估。

六、參考文獻

- 李宗宜、張良輝、陳瑾、陳杜甫，中部地區光化指標之分析研究，第廿一屆空氣污染控制技術研討會論文集，成功大學，台南，Nov.26-27(2004)。
- 王家麟、詹長權，九十二及九十三年度八站光化學評估測站操作品保及數據分析計畫，行政院環境保護署(2004)。
- 蔡政雄，臭氧前驅物連續監測與臭氧生成之光化學探討，中央大學，碩士論文(2001)。
- 吳志強、許書維、廖力蓉、范家鳳、蕭養成、江宙君、劉遵賢、李晶、張時禹，區域性氣象模式及大氣化學模式運算效能與演算法之探討，第廿二屆空氣污染控制技術研討會論文集，中央大學(2005)。
- 張時禹、李晶、蔣至剛、謝欣成、劉遵賢、許書維、吳志強，三維猶拉區域性空氣品質模式之發展，環境工程會刊(中華民國環境工程學會)，Vol. 16(4)，pp. 34-55(2005)。
- Atkinson, R., Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with organic compounds, Journal of Physical and Chemical Reference Data, Monograph. 1, pp. 1-246(1989)。

Atkinson, R., Gas-phase tropospheric chemistry organic compounds: a review, Atmos. Environ., Vol. 24A(1990)。

Atkinson, R., Atmospheric chemistry of VOCs and NO_x, Atmos Environ., Vol. 34, pp. 2063-2101(2000)。

Carter, W. P.L., John A. Pierce, Dongmin Luo, Irina L. Malkina, Environmental chamber study of maximum incremental reactivities of volatile organic compounds, Atmos. Environ., Vol. 29, pp. 2499-2511(1995)。

Cardelino, C. A., W. L. Chameides, An observation-based model for analyzing ozone precursor relationship in the ambient atmosphere, Journal of Air Waste Management Association, Vol. 45, pp. 161-180(1995)。

Ginnebaugh, D, J. Liang, M. Z. Jacobson, Comparison of a 13,500-Reaction Near-Explicit Chemical Mechanism With Smog Chamber Data and its Implementation Into a Fast Solver to Study the Ambient Sensitivity of E85 Versus Gasoline Emissions, 2007 AGU Fall Meeting (2007)。

Houweling, S., F. Dentener, J. Lelieveld, The impact of nonmethane hydrocarbon compounds on tropospheric photochemistry, J. Geophys. Res., Vol. 103, 10673-10696 (1998)。

Lee, B.-S., J.-L. Wang, Concentration variation

of isoprene and its implications for peak ozone concentration, Atmos. Environ., Vol. 40, pp. 5486-5495(2006).

Milford, J. B., D. Gao, S. Sillman, P. Bloss, and A. G. Russell, Total reactivity nitrogen (NOy) as an indicator for the sensitivity of ozone to NOx and hydrocarbons, J. of Geophys. Res., Vol. 99, pp. 3533-3542(1994).

Stockwell, W. R., P. Middleton, J. S. Chang, X. Tang, The Second Generation Regional Acid Deposition Model Chemical Mechanism for Regional Air Quality Modeling, J. Geophys. Res., Vol. 95, No. D10, pp. 16343-16367(1990).

Yang, K.-L., C.-C. Ting, J.-L. Wang, O.W. Wingenter, C.-C. Chan, Diurnal and seasonal cycles of ozone precursors observed from continuous measurement at an urban site in Taiwan, Atmos. Environ., Vol. 39, pp. 3221-3230(2006).

七、附圖

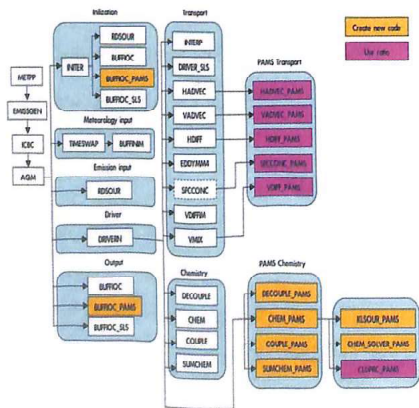


圖 1 PAMS_AQM 模式架構

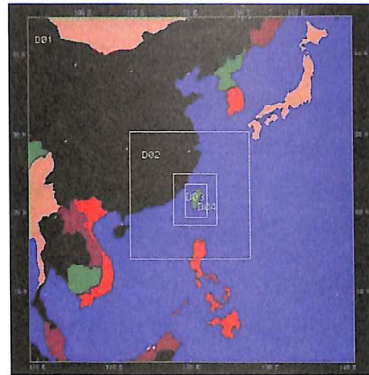


圖 2 台灣空氣品質模式之巢狀網格模擬範圍

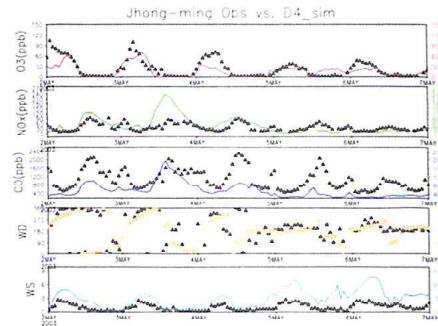


圖 3 空品測站(忠明站)時序圖(起始時間 8:00, 三角為觀測值, 實線為模擬值)

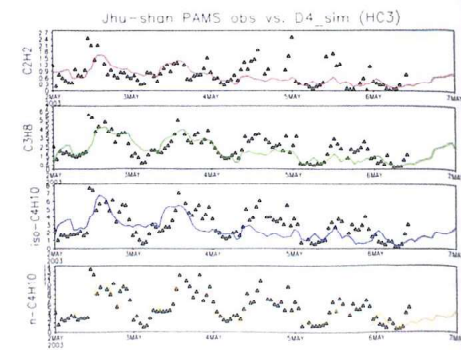


圖 4 歸類於 HC3 中 PAMS 觀測與模擬時序圖(起始時間 8:00, 三角為觀測值, 實線為模擬值, 濃度單位 ppbC)

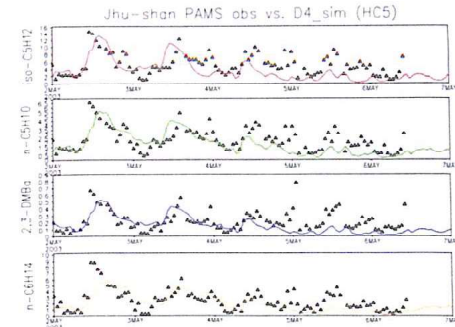


圖 5 歸類於 HC5 中 PAMS 觀測與模擬時序圖(起始時間 8:00, 三角為觀測值, 實線為模擬值, 濃度單位 ppbC)

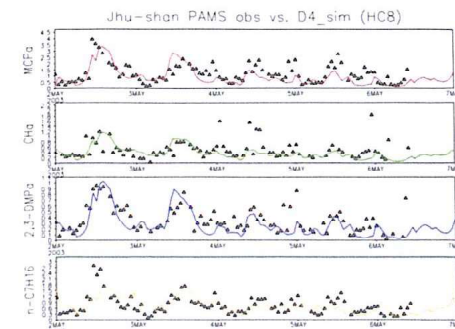


圖 6 歸類於 HC8 中 PAMS 觀測與模擬時序圖(起始時間 8:00, 三角為觀測值, 實線為模擬值, 濃度單位 ppbC)

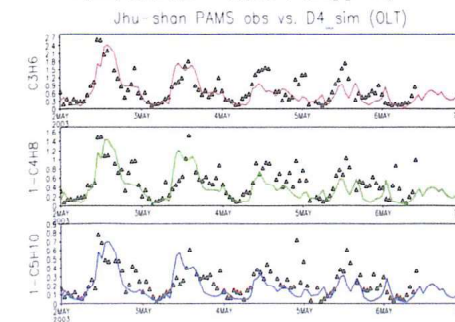


圖 7 歸類於 OLT 中 PAMS 觀測與模擬時序圖(起始時間 8:00, 三角為觀測值, 實線為模擬值, 濃度單位 ppbC)

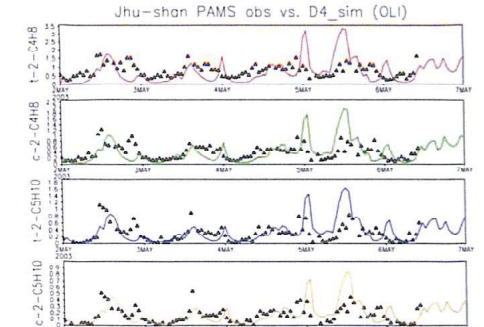


圖 8 歸類於 OLI 中 PAMS 觀測與模擬時序圖(起始時間 8:00, 三角為觀測值, 實線為模擬值, 濃度單位 ppbC)

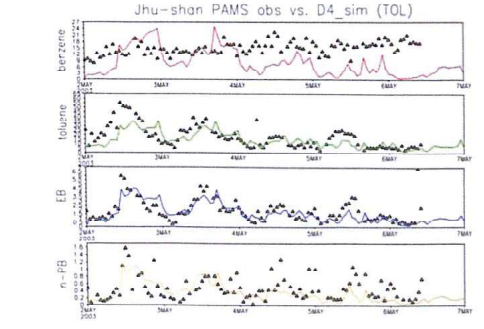


圖 9 歸類於 TOL 中 PAMS 觀測與模擬時序圖(起始時間 8:00, 三角為觀測值, 實線為模擬值, 濃度單位 ppbC)

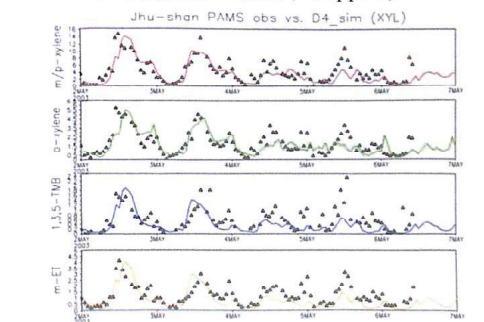


圖 10 歸類於 XYL 中 PAMS 觀測與模擬時序圖(起始時間 8:00, 三角為觀測值, 實線為模擬值, 濃度單位 ppbC)

表 1 模式與測站 VOC 物種對照表

| RADM2 化學機制 VOC 簡併物種 | PAMS 光化評估測站之 VOC 物種 |
|------------------------|--|
| ETH | Ethane |
| HC3 | Acetylene(C ₂ H ₂), Propane(C ₃ H ₈), Isobutane(iso-C ₄ H ₁₀), n-Butane(n-C ₄ H ₁₀), 2,2-Dimethylbutane(2,2-DMBa) |
| HC5 | Isopentane(iso-C ₅ H ₁₂), n-Pentane(n-C ₅ H ₁₂), Cyclopentane(CPa), 2,3-Dimethylbutane(2,3-DMBa), 2-Methylpentane(2-MPa), 3-Methylpentane(3-MPa), n-Hexane(n-C ₆ H ₁₄), 2,2,4-Trimethylpentane(2,2,4-TMPa) |
| HC8 | Methylcyclopentane(MCPa), 2,4-Dimethylpentane(2,4-DMPa), Cyclohexane(CHa), 2-Methylhexane(2-MHa), 2,3-Dimethylpentane(2,3-DMPa), 3-Methylhexane(3-MHa), n-Heptane(n-C ₇ H ₁₆), Methylcyclohexane(MCHa), 2,3,4-Trimethylpentane(2,3,4-TMPa), 2-Methylheptane(2-MHpa), 3-Methylheptane(3-MHpa), |

| | |
|-----|--|
| | n-Octane(n-C ₈ H ₁₈), n-Nonane(n-C ₉ H ₂₀), n-Decane(n-C ₁₀ H ₂₂), n-Undecane(n-C ₁₁ H ₂₄), n-Dodecane(n-C ₁₂ H ₂₆) |
| ISO | 2-methyl-1,3-butadiene |
| OL2 | Ethylene |
| OLI | trans-2-Butene(t-2-C ₄ H ₈), cis-2-Butene(c-2-C ₄ H ₈), trans-2-Pentene(t-2-C ₅ H ₁₀), cis-2-Pentene(c-2-C ₅ H ₁₀) |
| OLT | Propylene(C ₃ H ₆), 1-Butene(1-C ₄ H ₈), 1-Pentane(1-C ₅ H ₁₀), 2-methyl-1-pentene(2-M-1-Pe) |
| TOL | Benzene, Toluene, Ethylbenzene(EB), Styrene, Isopropylbenzene(iso-PB), n-Propylbenzene(n-PB) |
| XYL | m, p-Xylenes, o-Xylene, 1-ethyl-3-methylbenzene(m-ETol), 1-ethyl-4-methylbenzene(p-ETol), 1,3,5-Trimethylbenzene(1,3,5-TMB), 1-ethyl-2-methylbenzene(o-ETol), 1,2,4-Trimethylbenzene(1,2,4-TMB), 1,2,3-Trimethylbenzene(1,2,3-TMB), m-Diethylbenzene(m-DEB), p-Diethylbenzene(p-DEB) |

Diagnostic Modeling of PAMS VOC Observation

Sheng-Po Chen¹ Tsun-Hsien Liu² Tu-Fu Chen² Julius S. Chang²
Jia-Lin Wang³

¹ Weather Center, Weather Wing, CAF, R.O.C

²Institute of Atmospheric Physics, National Central University, Taiwan

³Department of Chemistry, National Central University, Taiwan

Abstract

While a number of gas-phase chemical mechanisms, such as CBM-Z, RADM2, SAPRC-07 had been successful in studying gas-phase atmospheric chemical processes they all used some lumped organic species to varying degrees. Photochemical Assessment Monitoring Stations (PAMS) has been in use for over ten years and yet it is not clear how the detailed organic species measured by PAMS compare to the lumped model species under regional-scale transport and chemistry interactions. By developing a detailed mechanism specifically for the PAMS organics and embedding this diagnostic model within a regional-scale transport and chemistry model we can then directly compare PAMS observation with regional-scale model simulations.

We modify one regional-scale chemical transport model (Taiwan Air Quality Model, TAQM) by adding a submodel with chemical mechanism for interactions of the 56 species observed by PAMS. This submodel then calculates the time evolution of these 56 PAMS species within the environment established by TAQM. It is assumed that TAQM can simulate the overall regional-scale environment including impact of regional-scale transport and time evolution of oxidants and radicals. Therefore we can scale these influences to the PAMS organic species and study their time evolution with their species-specific source functions, meteorological transport, and chemical interactions.

Model simulations of each species are compared with PAMS hourly surface measurements. A case study located in a metropolitan area in central Taiwan showed that with wind speeds lower than 3 m/s, when meteorological simulation is comparable with observation, the diurnal pattern of each species performs well with PAMS data. It is found that for many observations meteorological transport is an influence and that local emissions of specific species must be represented correctly. At this time there are still species that cannot be modeled properly. We suspect this is mostly due to lack of information on local variations on emissions.

Keywords : ozone precursors, volatile organic compounds, Photochemical Assessment Monitoring Stations, regional-scale chemical transport model