

О.П. Боровская, С.П. Смышляев, Т.В. Суходолов

АЛГОРИТМ ОЦЕНКИ АТМОСФЕРНЫХ УСЛОВИЙ, СПОСОБСТВУЮЩИХ УВЕЛИЧЕНИЮ УРОВНЯ ХИМИЧЕСКОЙ ЗАГРЯЗНЕННОСТИ ПРИРОДНОЙ СРЕДЫ

О.Р. Borovskaya, S.P. Smyshlyayev, T.V. Sukhodolov

CHEMICAL LIFETIME ESTIMATIONS FOR ATMOSPHERIC ANTHROPOGENIC SPECIES

Предлагается алгоритм для оценки условий в атмосфере, в результате которых повышается риск химического загрязнения окружающей среды. Основу алгоритма составляет сравнение химических времен жизни токсичных газов с постоянными времени переноса атмосферными упорядоченными и хаотичными потоками.

Ключевые слова: временные масштабы, время жизни, химические реакции, уравнение баланса химической примеси

An algorithm for atmospheric conditions of the potential environmental pollution assessment is proposed. The algorithm is based on the comparison of the time scale constant for the chemical processes (chemical lifetimes) and time scales for atmospheric resolved and eddy mass transport .

Key words: time scale, atmospheric lifetime, chemical reactions, species continuity equation

Попадающие в атмосферу химически активные примеси могут накапливаться в месте выбросов, если локальные метеорологические условия этому способствуют [1], или быстро разрушаться химическими процессами также в местах выбросов, если химическая ситуация в регионе этому способствует [2]. С другой стороны, эти химически активные примеси могут рассеиваться атмосферными потоками в горизонтальном направлении, или подниматься вверх в атмосферу, где они не представляют локальной токсической опасности, но могут влиять на химический и радиационный балансы и, следовательно, циркуляцию атмосферы [3]. Кроме того, атмосферный перенос может приводить и к накоплению химически опасных примесей в зонах, где отсутствуют локальные выбросы, но происходит конвергенция атмосферных потоков [4].

Исследование атмосферных условий, способствующих накоплению химически опасных примесей геосферы давно признается важной экологической задачей и проводится как экологическими, так и исследовательскими организациями [5]. Эти ис-

следования, как правило, направлены на изучение роли отдельных конкретных метеорологических явлений, способствующих ухудшению экологической ситуации [6]. Однако, для комплексной оценки условий, способствующих увеличению уровня химической загрязненности природной среды полезно иметь алгоритм, позволяющий по единым критериям сравнивать роль различных условий в формировании опасной токсичной ситуации как в отдельных регионах, так и в других районах. В настоящей работе подобный алгоритм предлагается на основе сравнения постоянных временных масштабов в уравнении баланса химически активной примеси геосферы.

Уравнение баланса химически активной примеси в геосфере представляет собой уравнение в частных производных, т.к. в нем содержатся производные по времени и пространству [7]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial(uN)}{\partial x} + \frac{\partial(vN)}{\partial y} + \frac{\partial(wN)}{\partial z} = \sum_i R_{N,i} + \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left[M(D_x + K_x) \frac{\partial N/M}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left(M(D_y + K_y) \frac{\partial N/M}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(M(D_z + K_z) \frac{\partial N/M}{\partial z} \right),$$

где N — концентрация рассматриваемого газа; u , v , w — скорости ветра в направлении x , y , z , соответственно; M — концентрация воздуха; D_x , D_y , D_z — коэффициенты диффузии по пространственным направлениям; K_x , K_y , K_z — коэффициенты турбулентности.

Первое слагаемое в правой части представляет собой сумму скоростей химической изменчивости концентрации рассматриваемой примеси геосферы. Оно имеет вид [8]:

$$\sum_i R_{N,i} = \sum_j k_j N_{j,1} N_{j,2} + \sum_l J_l N_l - \left(\sum_m k_m N_m + J_N + k_T + k_a \right) N.$$

Первое слагаемое в правой части данного уравнения описывает продукцию за счет химических реакций второго порядка, а второе слагаемое — продукцию за счет химических реакций первого порядка. Слагаемые в скобках, взятые с отрицательным знаком, характеризуют химическое разрушение примесей геосферы в результате химического взаимодействия с другими составляющими геосферы, термического разпада, фотодиссоциации и фазовых переходов в геосфере [9].

Это слагаемое, во-первых, приводит к необходимости решать не одно уравнение для каждой примеси, а систему уравнений для всех примесей из-за связи между концентрациями разных газов, а во-вторых, придает этой системе уравнений баланса газовых примесей нелинейность за счет перемножения рассчитываемых концентраций.

Таким образом, стоит задача решения системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\frac{\partial N_j}{\partial t} + \frac{\partial(uN_j)}{\partial x} + \frac{\partial(vN_j)}{\partial y} + \frac{\partial(wN_j)}{\partial z} = \sum_i R_{N_j,i} + \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left[M(D_x + K_x) \frac{\partial N_j/M}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} () + \frac{\partial}{\partial z} (), \quad j = 1, 2, \dots, L$$

где L — количество рассматриваемых примесей, определяемое поставленной задачей.

В основе метода оценки условий, способствующих увеличению уровня загрязненности природной среды, лежит сравнение химических времен жизни с постоянными времени атмосферного трансграничного переноса и времени выведения химически активных примесей из разных частей геосферы. Для осуществления подобного сравнения используется метод масштабов на основе оценки значимости слагаемых разных членов уравнения баланса химически активной примеси в геосфере.

Если переписать уравнение баланса химически активной примеси геосферы в виде уравнения эволюции:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \sum_i R_{N,i} - \frac{\partial(uN)}{\partial x} - \frac{\partial(vN)}{\partial y} - \frac{\partial(wN)}{\partial z} + \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left[M(D_x + K_x) \frac{\partial N/M}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[M(D_y + K_y) \frac{\partial N/M}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[M(D_z + K_z) \frac{\partial N/M}{\partial z} \right],$$

то каждое слагаемое в правой части показывает вклад в тенденцию изменения химически активной примеси геосферы, стоящую в левой части. Размерность тенденции представляет собой размерность скорости изменения концентрации, т.е. молекул/ (см³с). Увеличение уровня загрязненности природной среды будет происходить, если при рассмотрении уравнения эволюции для токсичной химически активной примеси геосферы тенденция будет положительная.

Знак тенденции для токсичной примеси определяется балансом слагаемых в правой части уравнения эволюции. Первое слагаемое представляет собой скорость локального химического изменения содержания химически активной примеси геосферы. Ее масштабной характеристикой является химическое время жизни. При этом химическое время жизни является характеристикой, относящейся к оценке скорости разрушения химически активной примеси геосферы. Между тем, аналогичную характеристику можно использовать и для оценки времени увеличения концентраций токсичных примесей геосферы до опасных значений.

Химическое время жизни оценивается по отношению концентрации химически активной примеси геосферы к скорости ее химического разрушения. При этом в связи с тем, что в соответствии с принципами химической кинетики скорость разрушения конкретной примеси пропорциональна ее концентрации, значение концентрации присутствовало и в числителе и в знаменателе. В результате этого, после сокращения значений концентрации в числителе и знаменателе величина химического времени не зависела от концентрации рассматриваемого газа. При расчете постоянной времени нарастания концентрации токсичной химически активной примеси геосферы нужно осуществлять процедуру, аналогичную вычислению химического времени жизни, только не для скорости разрушения, а для скорости образования примеси, т.е. делить концентрацию примеси на скорость ее продукции:

$$\tau_{p,N} = \frac{N}{\sum_j k_j N_{j,1} N_{j,2} + \sum_i J_i N_i}.$$

При этом в отличие от вычисления химического времени жизни, скорость продукции в знаменателе не зависит от концентрации исследуемого токсичного химиче-

ски активного газа геосферы. В результате, концентрация рассматриваемой примеси геосферы в числителе не сокращается и должна задаваться при вычислении постоянной времени нарастания концентрации токсичной примеси.

В связи с тем, что опасные значения концентраций токсичных составляющих геосферы контролируются экологическими органами путем задания предельно допустимых концентраций (ПДК), для оценки условий, способствующих увеличению уровня химической загрязненности окружающей среды целесообразно использовать значения ПДК в числителе данной формулы для вычисления времени нарастания концентраций примесей до опасных значений. Таким образом, разработанная в настоящем проекте модель эволюции химически активных примесей геосферы используется для вычисления скоростей продукции и разрушения, которые стоят в знаменателе формул для вычисления времени жизни и времени нарастания концентрации, а данные о ПДК только для вычисления времени нарастания. При этом для оценки условий, способствующих увеличению уровня химической загрязненности природной среды, нужно рассчитывать как время жизни, так и время нарастания концентрации, т.к. фактическая роль химических процессов в геосфере в уровне загрязнения оценивается по разности времени жизни и времени нарастания. Если время жизни больше, чем время нарастания, то будет происходить ухудшение экологической обстановки в геосфере, а если время нарастания больше, чем время жизни, то означает, что химически активные токсичные примеси геосферы разрушаются быстрее, чем образуются и нарастания уровня загрязненности не происходит.

Остальные слагаемые в правой части уравнения эволюции, которые описывают влияние переноса массы горизонтальными и вертикальными упорядоченными, диффузионными и турбулентными потоками в геосфере, также оказывают влияние на знак и величину тенденции изменчивости (эволюции) содержания токсичной химически активной примеси в геосфере. Второе, третье и четвертое слагаемые описывают дивергенцию (расходимость) потока примеси геосферы за счет упорядоченного переноса массы потоками и течениями в геосфере. Если дивергенция положительна, то содержание токсичной примеси рассеивается по геосфере и условия химического загрязнения не ухудшаются. Это описывается отрицательным знаком слагаемых дивергенции в уравнении эволюции. Если дивергенция упорядоченного потока отрицательна, это означает, что происходит конвергенция потока, т.е. скопление химически активной токсичной примеси в зоне конвергенции. В этом случае увеличивается уровень химической загрязненности природной среды в данном районе.

Для оценки вклада дивергенции упорядоченного потока в тенденцию изменчивости химически активной токсичной примеси геосферы необходимо оценить постоянную времени этого процесса, определить происходит конвергенция или дивергенция и сравнить постоянные времени дивергенции с постоянными времени химических процессов, т.е. временем жизни и времени накопления. Т.к. в этих слагаемых в уравнениях эволюции стоят производные по пространственным переменным, для оценки временных постоянных необходимо задать пространственные масштабы изменчивости. Таким образом постоянная времени упорядоченного (адвективного) переноса может быть оценена по формуле:

$$\tau_{Ad,N} = \frac{N}{div(vN)}$$

Три последних слагаемых в уравнении эволюции описывают тенденцию изменчивости концентрации химически активной токсичной примеси геосферы за счет турбулентного и диффузионного переноса в геосфере. Этот вид переноса определяется хаотичным движением молекул (диффузия) или объемов массы (турбулентность) в геосфере. Направление действия этих процессов происходит в сторону выравнивания концентраций примеси в соседних точках геосферы. Действие потока происходит против градиента изменчивости концентрации, т.е. от больших концентраций в сторону меньших концентраций, в чем и заключается процесс выравнивания. Скорость выравнивания определяется коэффициентами диффузии и турбулентности, которые задаются по экспериментальным данным и параметрическим расчетам эффективности процессов подсеточного масштаба.

Для вычисления постоянной времени турбулентных и диффузионных процессов используются данные о ПДК, коэффициентах турбулентности и диффузии и пространственных масштабах аналогично заданным для расчета постоянной времени адвективных процессов:

$$\tau_{Ad,N} = \frac{N}{\frac{\partial}{\partial x} \left[M(K_x + D_x) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{N}{M} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[M(K_y + D_y) \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{N}{M} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[M(K_z + D_z) \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{N}{M} \right) \right]}$$

Таким образом, методика модельной оценки условий, способствующих увеличению уровня загрязненности природной среды, заключается по последовательном выполнении следующих шагов:

- а) Оценка химического времени жизни рассматриваемой токсичной химически активной примеси геосферы;
- б) Задание предельно допустимых концентраций рассматриваемой примеси;
- в) Вычисление постоянной времени химического накопления рассматриваемой примеси;
- г) Задание пространственных масштабов изменчивости данной химической примеси;
- д) Вычисление постоянной времени дивергенции упорядоченного потока рассматриваемой примеси в геосфере;
- е) Вычисление постоянной времени диффузионного и турбулентного переноса данной химически активной примеси;
- ж) Сравнение времен жизни всех процессов влияющих на тенденцию изменчивости рассматриваемой химической примеси геосферы и выделение доминирующих эффектов;
- з) Выделение процессов влияющих на увеличение тенденции (имеющих положительный знак в правой части уравнения эволюции);
- и) Анализ причин изменчивости этих процессов и оценка вероятности увеличения их положительного вклада в тенденцию изменчивости химически активной примеси геосферы;

- к) Выдача рекомендаций для экологических органов по увеличению внимания к процессам вносящим вклад в увеличение тенденции изменчивости концентраций химически активных токсичных примесей геосферы.

Работа выполнена в Российском государственном гидрометеорологическом университете в рамках участия в Федеральной Целевой Программе «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (ГК № П734 от 20 мая 2010 г.), мероприятие 1.2.1 по направлению «Геохимия».

Литература

1. *Jacobson M.Z.* Fundamental of atmospheric modeling. – University Press, Cambridge, 1999. – 656 pp.
2. *Brasseur G.* Atmospheric Chemistry and Global Change [Текст]/ G. Brasseur, J. Orlando, G. Tyndall, Oxford University Press, 1999
3. *Seinfeld, J.H.* Atmospheric Chemistry and Physics / J.H. Seinfeld, S.N. Pandis // Wiley Interscience. 1998. P. 22-26.
4. *Jacob, D.J.* Introduction to Atmospheric Chemistry / D.J. Jacob // Princeton Univ. Press. 1999. P.23-24.
5. *Меньшиков В.В., Швыряев А.А.* Опасные химические объекты и техногенный риск: Учебное пособие. М.: Изд-во Химия, фак. Моск. ун-та, 2003.
6. *Андруз Дж., Бримблекумб П., Джикелз Т., Лице П.* Введение в химию окружающей среды. Пер с англ. М.: Мир, 1999.
7. *Эммануэль А.Б., Кнорре Р.Б.* Основы химической кинетики. Наука. 1968. - 413 с.
8. *Dvortsov V.L., Geller M.A., Yudin V.A., Smyshlyaev S.P.* Parameterization of the convective transport in a two-dimensional chemistry-transport model and its validation with radon 222 and other tracer simulations // Journal of Geophysical Research. 1998. V. 103. № D17. P. 22047-22062.
9. *Смышляев С.П., Галин В.Я., Володин Е.М.* Модельное исследование межгодовой изменчивости содержания атмосферного озона в средних широтах // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2004. Т.40. № 2. С. 211-222.