

*М.А. Моцаков, С.П. Смышляев*

**МОДЕЛЬ ИЗМЕНЧИВОСТИ ГАЗОВОГО СОСТАВА  
ПРИЗЕМНОГО СЛОЯ АТМОСФЕРЫ  
ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ПОТОКОВ ХИМИЧЕСКИ АКТИВНЫХ  
ПРИМЕСЕЙ С ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ**

*M.A. Motsakov, S.P. Smyshlyayev*

**ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER COMPOSITION MODELING:  
RESPONSE TO THE CHEMICAL FLUXES FROM SURFACE**

*Описана разработанная модель химической трансформации в атмосфере продуктов поверхностных выбросов химически активных газов. Модель построена по конечно-разностной схеме и позволяет учесть взаимодействие и обратные связи между химическими процессами в приземном слое атмосферы и приповерхностном слое подстилающей поверхности. Обмен примесями между атмосферой и поверхностью осуществляется по потоковой схеме с учетом разницы концентраций в верхнем слое поверхности и на нижнем уровне приземного слоя. Сравнение результатов модельных расчетов с результатами измерений для озона и других газов показало, что модель правильно воспроизводит основные особенности их распределения в атмосфере и может быть использована для изучения особенностей химического взаимодействия между разными частями геосферы.*

*Ключевые слова: геосфера, химические процессы, моделирование, обратные связи.*

*A new model for chemical transformation of trace gases emitted from surface to atmosphere has been developed and described. The model is designed as finite difference numerical one with a possibility to account interaction between chemical processes in the atmospheric boundary layer and upper layer of the surface. Species exchange between surface and atmosphere is considered based on fluxes estimation for the lowermost atmosphere and upper layer of the surface. Model validation with natural observations for ozone and long-lived gases demonstrated that model is capable to catch most of observed features of the studied gases and may be recommended for the future research studies oriented toward investigation of the chemical interaction between surface and atmosphere.*

*Key words: geo-sphere, chemical processes, modeling, feedbacks.*

## **Введение**

В последнее время в мире отмечается тенденция увеличения обмена химически и активными газами между подстилающей поверхностью и атмосферой [1]. В результате поверхностных выбросов значительного количества химически активных газов, с одной стороны, меняется токсикологическая обстановка в приземном слое атмосферы, что является критичным для человека и биосферы [2]. С другой стороны, меняются условия нагрева атмосферы в результате поглощения солнечной радиации химически активными газами и их собственного излучения инфракрасной радиации, что может привести к изменению ус-

ловий погоды и климата [3]. Наконец, изменяются условия химического загрязнения почвы в результате поглощения продуктов химической трансформации газов в атмосфере [4]. При этом важную роль начинают играть обратные связи между химическими процессами в атмосфере и приповерхностном слое подстилающей поверхности.

Обратные связи заключаются в том, что при увеличении количества химически активных составляющих в атмосфере в результате выбросов с подстилающей поверхности меняются условия для прохождения химических реакций в приповерхностном слое суши или океана. В результате этого может или увеличиться поток химически активных газов с поверхности в атмосферу (положительная обратная связь), или уменьшиться поток химически активных газов в атмосферу (отрицательная обратная связь). Конкретные условия для формирования положительной или отрицательной обратных связей зависят от вида подстилающей поверхности, интенсивности выбросов, соотношения между выбросами различных химических составляющих, метеорологических условий на границе раздела и сезона.

Для получения количественных оценок влияния конкретных условий на формирование положительных или отрицательных обратных связей необходимо создавать математические модели химической трансформации исследуемых примесей в приземном слое атмосферы и приповерхностном слое подстилающей поверхности, т.к. только математическая эмуляция происходящих в реальности химических процессов позволяет изучить все многообразие возможных обратных связей [5].

Математические модели химических процессов в окружающей среде требует разработки схем химических реакций, происходящих в приземном слое атмосферы и приповерхностном слое подстилающей поверхности, определения констант этих реакций и зависимости скоростей химических реакций от окружающих условий. В результате создания подобной модели химической трансформации экологически важных примесей в приземном слое атмосферы и приповерхностном слое подстилающей поверхности будет реализована возможность контроля за качеством воздуха и прогноз его изменчивости.

В этой связи основной целью выполнения настоящей работы является создание модели химической трансформации экологически важных примесей в приземном слое атмосферы и приповерхностном слое подстилающей поверхности для анализа их изменчивости с учетом обмена химически активными газами между атмосферой и подстилающей поверхностью.

### **1. Химический состав приземного слоя атмосферы**

Газовый состав приповерхностного воздуха практически полностью определяется потоками химически активных примесей с подстилающей поверхности, т.е. с поверхности суши и океана [1–3]. Более того, химические процессы в стратосфере, т.е. в высотном интервале от 12 до 50 км также, в значительной

степени, зависят от потоков химически активных газов с подстилающей поверхности [2, 6]. Долгоживущие химические газы поверхностного происхождения в результате атмосферной циркуляции перемешиваются по атмосфере и многие из них достигают стратосферы, где определяют баланс азотных, водородных, хлорных и бромных составляющих, влияющих на содержание стратосферного озона [7]. В этой связи процессы, определяющие потоки химически активных газов с земной поверхности в атмосферу, являются критичными, как для приповерхностного слоя воздуха где происходит жизнедеятельность живых существ, так и для свободной тропосферы и стратосферы, химические и физические процессы в которых определяют особенности погоды и климата [1, 3, 5, 8, 9].

Среди газов, оказывающих существенное влияние на химию атмосферы и имеющих поверхностное происхождение, выделяются азотные составляющие, имеющие почвенное происхождение и являющие субъектом антропогенных эмиссий [4, 7, 10], углекислый газ, определяющий формирование парникового эффекта и имеющий как земные, так и океанские источники и стоки [11], метан, определяющий продукцию приземного и тропосферного озона и имеющий только поверхностные источники и не продуцируемый в атмосфере [12], неметановые углеводородные составляющие, играющие сходную с метаном роль в формировании особенностей химии атмосферы и особенно важные для промышленных и населенных районов [13], а также окислы металлов и кремния и фосфаты, влияющие на формирование атмосферного аэрозоля в приповерхностном слое атмосферы и гетерогенные реакции на его поверхности [14].

Один из основных продуктов химической трансформации химически активных газов в атмосфере поверхностного происхождения – озон непрерывно возникает и разрушается в приземном слое атмосферы [15, 16]. Скорость продукции и разрушения озона и, как следствие, его количество в каждый момент времени в фиксированном объеме атмосферы определяет ряд астрономических, метеорологических и химических факторов. Всю совокупность процессов определяющих изменение концентрации озона можно разделить на два класса – динамические и химические. В рамках данной работы рассматриваются последние из них.

## **2. Методология моделирования изменчивости химического состава приземного слоя воздуха и приповерхностного слоя подстилающей поверхности**

Химические процессы в почве, атмосфере и океане можно унифицировано определить как процессы переноса в сплошной среде при наличии химических реакций. Математическая формулировка подобной задачи базируется на системе уравнений неразрывности многокомпонентной среды при наличии локального источника [17]:

$$\frac{\partial X}{\partial t} + V \nabla X = R(X), \quad (1)$$

где  $X = X_1, X_2, \dots, X_N$  – вектор концентраций рассматриваемых примесей;  $N$  – число рассматриваемых примесей,  $V \cdot \nabla$  – линейный дифференциальный оператор, описывающий пространственный перенос примеси;  $R$  – скорость фотохимического изменения, которая определяется протекающими в сплошной среде процессами фотодиссоциации, бимолекулярными и трехмолекулярными химическими реакциями, мономолекулярным распадом и гетерогенными процессами.

Скорость фотодиссоциации  $S_i$  какой-либо компоненты с концентрацией  $X_i$  описывается, согласно [4] реакцией первого порядка:

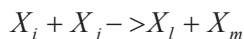
$$S_i = J_i X_i, \quad (2)$$

где  $J_i$  – коэффициент фотодиссоциации:

$$J_i = \int_{\Delta\lambda} \sigma_i(\lambda) \nu_i(\lambda) F_\lambda d\lambda, \quad (3)$$

где  $\lambda$  – длина волны солнечного излучения,  $\Delta\lambda$  – спектральная область фотодиссоциации  $i$ -й компоненты,  $\sigma_i$  – сечения поглощения,  $\nu_i$  – квантовый выход реакции,  $F_\lambda$  – суммарный поток радиации с длиной волны  $\lambda$  в данной точке пространства.

Скорости химических реакций и мономолекулярного распада параметризуются в терминах химической кинетики [18]. При этом скорости бимолекулярных реакций типа



описываются выражением

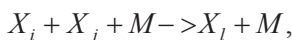
$$\frac{dX_l}{dt} = \frac{dX_m}{dt} = -\frac{dX_i}{dt} = -\frac{dX_j}{dt} = k_b X_i X_j, \quad (4)$$

где  $k_b$  – лабораторная константа данной химической реакции, рассчитываемая по формуле Аррениуса [4]:

$$k_b = A \exp[-E/(RT)], \quad (5)$$

здесь  $A$  – лабораторная константа;  $E$  – энергия активации данной реакции;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $T$  – температура.

Более сложным образом описываются скорости протекающих в сплошной среде трехмолекулярных реакций типа



где  $M$  – концентрация всех молекул. Реакции такого типа сильно зависят от давления [5]. При низких давлениях время между столкновениями образующегося на первой стадии реакции возбужденного комплекса с дезактивирующей

молекулой больше или сравнимо со временем жизни возбужденного комплекса и реакция является тримолекулярной. При высоких давлениях время между столкновениями мало по сравнению со временем жизни возбужденного комплекса и он успевает дезактивироваться до распада. Реакция при этом является бимолекулярной. С учетом этого скорость трехмолекулярной реакции описывается по аналогии с бимолекулярными реакциями:

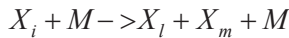
$$\frac{dX_l}{dt} = -\frac{dX_i}{dt} = -\frac{dX_j}{dt} = k_p X_i X_j, \quad (6)$$

где  $k_p$  описывается универсальной формулой Линдемана-Хиншельвуда [4]:

$$k_p = F_p \frac{k_0 M}{1 + k_0 M / k_\infty}, \quad (7)$$

где  $F_p = F_0^{[1 + (\lg \frac{k_0 M}{k_\infty})^2]^{-1}}$ ;  $k_0 = A_0 (T/300)^{-n}$ ;  $k_\infty = A_\infty (T/300)^{-m}$ , а  $F_0, A_0, A_\infty, n, m$  – лабораторные константы данной химической реакции.

Процессы мономолекулярного распада типа



рассматриваются как реакции второго порядка и их скорости записываются в виде

$$\frac{dX_l}{dt} = \frac{dX_m}{dt} = -\frac{dX_i}{dt} = k_m X_i M, \quad (8)$$

где  $k$  определяется по формуле Аррениуса (1.5).

Гетерогенные процессы описываются уравнениями первого порядка [19]:

$$\frac{dX_i}{dt} = -k_a X_i \quad (9)$$

Константы гетерогенных реакций  $k_a$  вычисляются в предположении свободномолекулярного режима.

Таким образом, слагаемые в правой части системы (1), выражающие скорости химического изменения рассматриваемых малых газов, можно записать в виде:

$$R_j = \sum_{i,m} k_{im} X_i X_m + \sum_l J_l X_l - \left( \sum_m k_{jm} X_m + J_j + k_{mj} + k_{aj} \right) X_j \quad (10)$$

$$j = 1, 2, \dots, N,$$

где члены в правой части с положительным знаком описывают химическую продукцию (за счет химических реакций и фотодиссоциационных процессов), а члены с отрицательным знаком – химическое разрушение (за счет химических реакций, фотодиссоциационных процессов, мономолекулярного распада и гетерогенных процессов).

Чтобы полностью сформулировать задачу необходимо еще задать область определения  $\Omega$  с границей  $G$  и задать граничные и начальные условия:

$$lX = g; \quad (11)$$

$$X|_{t=0} = X_0, \quad (12)$$

где  $l$  – линейный оператор граничного условия;  $X_0$  – вектор начальных значений концентраций рассматриваемых газов.

В качестве оператора граничного условия для атмосферной химической модели обычно используются потоки химически активных газов с земной или океанской поверхности. При этом эти потоки фиксируются без учета обратного влияния процессов в атмосфере на химические процессы в почве и океане. В настоящем проекте впервые предполагается учитывать обратные связи между химическими процессами в почве, атмосфере и океане. Для этого химические блоки во всех трех сферах будут объединены в интерактивную модель с динамичными граничными условиями.

Сформулированная задача является нелинейной смешанной краевой задачей [20]. Для подобных задач пока не разработаны методы получения аналитических решений и поэтому для их решения используются численные методы [20]. Их применение заключается в замене области непрерывного изменения аргументов областью их дискретного изменения, а также в замене дифференциальных операторов – разностными с дальнейшим решением полученной таким образом алгебраической системы уравнений.

Поставленная задача является смешанной краевой задачей [21]. Для сведения ее к задаче с начальными данными (задаче Коши) необходимо задать шаблон в выбранной пространственной области и аппроксимировать на нем дифференциальные операторы по пространственным переменным их конечно-разностными аналогами. В результате система дифференциальных уравнений (1), (10)–(12) заменяется системой дифференциально-разностных уравнений:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \Lambda Y = R(Y), \quad (15)$$

где  $Y$  – конечно-разностная функция концентраций рассматриваемых газов во всех пространственных узлах, соответствующая непрерывной функции  $X$ ;  $\Lambda$  – конечно-разностное представление дифференциального оператора  $\nabla$ .

Рассматриваемая задача Коши обладает рядом специфических особенностей, ограничивающих использование для ее решения многих обычно применяемых численных методов. Так, высокие скорости химических реакций обуславливают сильную связь между уравнениями – ее жесткость [21]. Математически это выражается большим разбросом модуля собственных значений матрицы Якоби [20]:

$$\max[\operatorname{Re}(-\lambda_i)] / \min[\operatorname{Re}(-\lambda_i)] \gg 1, \quad (16)$$

где  $\lambda_i$  – собственные числа матрицы Якоби

$$J(t, Y) = \|\partial f / \partial Y\|. \quad (17)$$

Жесткость задачи приводит к практической непригодности для ее решения явных вычислительных схем, т.к. для устойчивости явной схемы необходимо, чтобы шаг по времени не превышал минимальной временной постоянной системы, отвечающей максимальному собственному значению Якобиана  $\tau_{\min} = 1 / \max[\operatorname{Re}(-\lambda_i)]$ , в то же характерное время задачи определяется максимальной локальной временной постоянной, отвечающей минимальному собственному значению матрицы Якоби. В этой связи, для достижения сходимости решений необходимое количество шагов будет порядка коэффициента жесткости (отношение максимального собственного числа к минимальному), который для атмосферных задач достигает  $10^7$ – $10^8$ .

В связи с трудностями, возникающими при решении "жестких" задач традиционными методами, разрабатываются специальные методы для подобных систем уравнений [21]. Среди этих методов применительно к фотохимическому моделированию процессов в сплошной среде можно выделить два направления: применение общих методов решения "жестких задач" и разработка специальных методов для фотохимического моделирования.

При применении общих методов для аппроксимации дифференциальных уравнений типа (15) конечно-разностными используются линейные одношаговые или многошаговые А-устойчивые методы, для которых областью абсолютной устойчивости является вся полуплоскость  $\operatorname{Re}(\tau\lambda) < 0$ . Полученная система алгебраических уравнений решается методом Ньютона-Рафсона [21]:

$$[I - \tau\beta f^{(m)}]J(X_{j+1}^{(m)} - X_j^{(m)}) = -X_{j+1}^{(m)} + \tau\beta f(t + \tau, X_{j+1}^{(m)}) + g, \quad (18)$$

где  $I$  – единичная матрица;  $\tau$  – шаг по времени;  $\beta$  – неявный коэффициент выбранного А-устойчивого метода;  $J$  – якобиан системы;  $m$  – номер итерации,  $g$  – заданный вектор, объединяющий явные члены уравнения.

Учитывая (2.10), применение метода Ньютона-Рафсона (18) к системе (15) сводится к следующей линеаризации каждого слагаемого суммы (10):

$$k_{il}X_iX_j = k_{il}X_i^jX_l^{j+1} + k_{il}X_i^{j+1}X_l^j - k_{il}X_i^jX_l^j, \quad (19)$$

где  $j$  обозначает номер временного слоя ( $j$  – явный,  $j + 1$  – неявный). Для решения получающейся алгебраической системы необходимо на каждом шаге обращать квадратную матрицу размерности ( $N \times K$ ), где  $N$  – количество рассматриваемых атмосферных газов,  $K$  – число узлов сетки, что оказалось малоэффективным, учитывая уровень доступных ЭВМ.

### 3. Валидация модели по результатам измерений

Для валидации модели обмена химическими примесями между подстилающей поверхностью и атмосферой было произведено сравнение результатов

модельных расчетов с результатами измерений. Сравнение результатов моделирования с измерениями проводилось для сезонно-широтной изменчивости анализируемых газов для территории Российской Федерации. Это связано с отсутствием глобального охвата данными измерений по всей территории РФ, а осреднение по долготе позволяет проводить сравнение и по ограниченному количеству данных измерений.

Одним из универсальных критериев качества модели является ее способность воспроизводить распределения озона, сезонно-широтная изменчивость которого определяется взаимодействием химии и динамики атмосферы [22, 23]. При этом основные, наиболее характерные черты изменчивости содержания озона в приземном слое атмосферы в наибольшей степени контролируются изменчивостью потоков химически активных веществ с подстилающей поверхности. Таким образом, способность модели воспроизводить сезонно-широтную изменчивость содержания озона в приземном слое атмосферы, главным образом характеризует достоверность модельного описания обмена химически активными газами между приповерхностным слоем подстилающей поверхности и приземным слоем атмосферы.

На рис. 3.1 представлено высотно-широтное распределение отношения смеси озона для средних месяцев четырех сезонов, осредненное по результатам измерений в приземном слое атмосферы для территории Российской Федерации [24, 25]. Можно отметить следующие характерные черты в распределении озона:

- а) максимум отношения смеси в южных широтах, в течение всего года;
- б) сдвиг максимума концентрации в сторону летнего полушария в сезоны солнцестояния (январь и июль);
- в) наклон изолиний концентраций из зимнего полушария в летнее полушарие, в верхней части приземного слоя атмосферы;
- г) повышенные максимальные значения концентрации озона, превышающие 10 ppм весной и осенью;
- д) сгущение линий постоянной концентрации озона в нижней части южных широт.

На рис. 3.2 представлены рассчитанные с помощью модели приземного слоя атмосферы и приповерхностного слоя подстилающей поверхности отношения смеси озона для тех же месяцев и также осредненные для 1986–1996 гг. Модельный комплекс качественно хорошо воспроизводит все отмеченные выше высотно-широтные особенности концентрации озона. Среди количественных отличий можно отметить некоторую недооценку концентрации озона в верхней части приземного слоя.

Кроме валидации по озону в настоящей работе проводилось также сравнение результатов расчетов и измерений для долгоживущих газов приземного слоя атмосферы. Долгоживущими являются газы, имеющие время жизни относительно разрушения фотохимическими процессами намного превосходящее характерное время переноса воздушных масс атмосферными процессами. Срав-



нение модельных распределений долгоживущих газов с результатами измерений характеризует правильность соотношения между моделированием химии и циркуляции атмосферы.

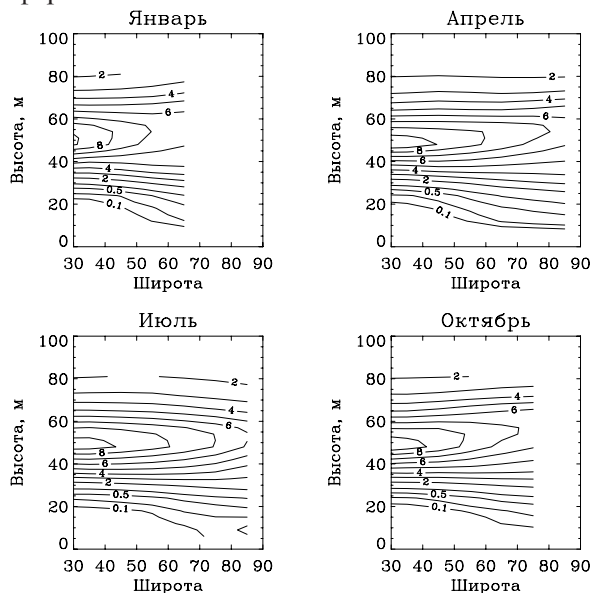


Рис. 3.1. Отношение смеси озона в приземном слое атмосферы по результатам наблюдений

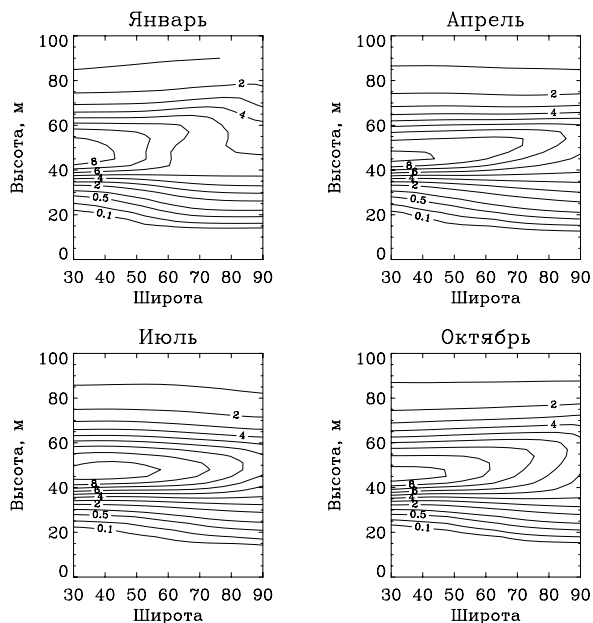


Рис. 3.2. Отношение смеси озона в приземном слое атмосферы по результатам модельных расчетов

Среди долгоживущих газов, играющих важную роль для распределения озона, выделяют метан ( $\text{CH}_4$ ) и закись азота ( $\text{N}_2\text{O}$ ). Метан является источником водорода и способствует образованию озона в нижней атмосфере, а закись азота является основным источником азотосодержащих радикалов, являющихся основными разрушителями озона в средней стратосфере. Эти газы измерялись различными приборами со спутника UARS, что позволило составить композиционные базы данных об особенностях высотно-широтного распределения метана и закиси азота в стратосфере [47].

На рис. 3.3 приведены отношения смеси метана, полученные в результате зонального осреднения результатов измерений прибором HALOE со спутника UARS. Результаты приведены для средних месяцев четырех сезонов, осредненные за период измерений. Метан является газом, попадающим в атмосферу в результате эмиссий с земной поверхности, и не имеет химической продукции в атмосфере. Его разрушение в атмосфере происходит в результате химического взаимодействия с  $\text{OH}$  и, в меньшей степени, в результате фотодиссоциации и взаимодействия с атомарным кислородом.

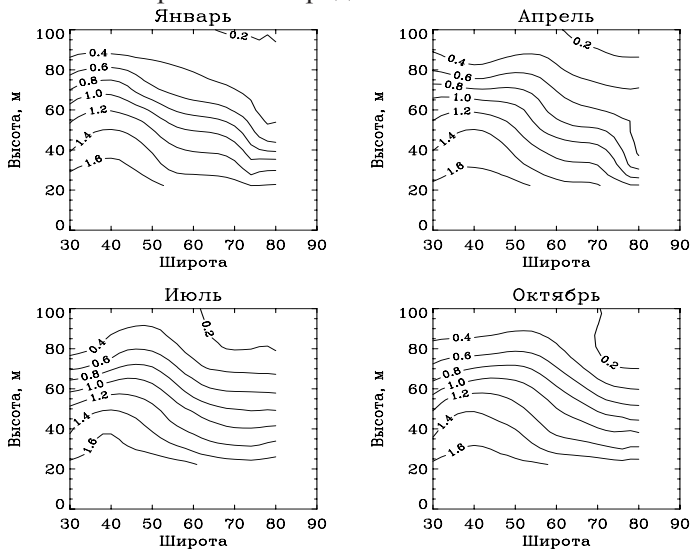


Рис. 3.3. Отношение смеси метана по результатам измерений прибором HALOE спутника UARS

Особенности попадания метана в атмосферу и его разрушения там приводят к монотонному убыванию концентрации с высотой. При этом в тропосфере отношение смеси метана практически однородно, как по высоте, так и по широте. В стратосфере характерными особенностями распределения метана являются: повышенные концентрации в тропической зоне, характеризующие сильный подъем вертикальными потоками в течение всего года; широтное выравнивание в средних и высоких широтах, особенно заметное в зимнем полушарии, характеризующее активность планетарных волн; сдвиг тропического максимума в Юж-

ное полушарие в верхней стратосфере и более равномерное широтное распределение отношения смеси в верхней стратосфере для равноденствия (апрель и октябрь).

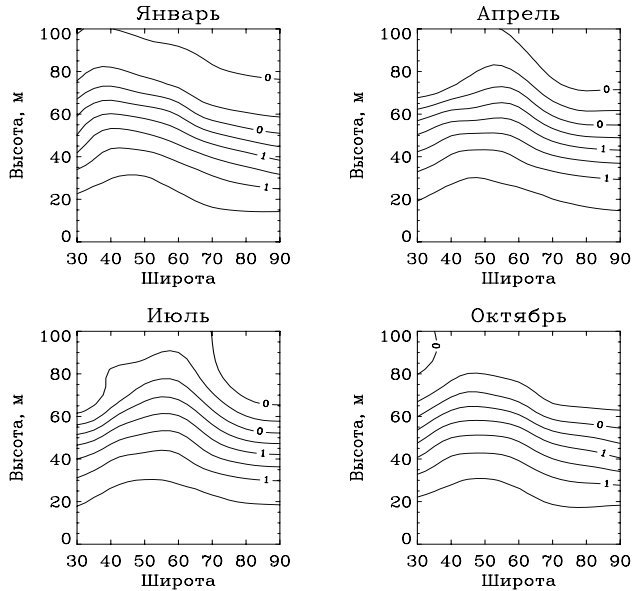


Рис. 3.4. Отношение смеси метана по результатам модельных расчетов

На рис. 3.4 приведено отношения смеси метана, рассчитанное на модели приземного слоя атмосферы и приповерхностного слоя подстилающей поверхности. Модель качественно хорошо воспроизводит наблюдаемые особенности распределения метана. В количественном отношении можно отметить, что в верхней части приземного слоя атмосферы модель занижает концентрации метана, со сдвигом на 1-2 шага модельной сетки.

На рис. 3.5 приведено высотно-широтное распределение закиси азота по результатам измерений прибором CLAES на спутнике UARS. Закись азота, также как и метан, имеет поверхностные источники, что приводит к монотонному убыванию ее концентрации с высотой. Атмосферная химия закиси азота отличается от химии метана тем, что, во-первых, для  $N_2O$  существует небольшой атмосферный источник в результате химического взаимодействия окислов азота, а, во-вторых, основное разрушение закиси азота происходит в результате взаимодействия с возбужденным атомарным кислородом, а не с водородными радикалами.

Концентрация атомарного кислорода, в отличие от гидроксила, сильно увеличивается с высотой, при незначительных количествах у земной поверхности. В результате, в тропосфере закись азота практически не разрушается и вся попадает в стратосферу, где в результате химических реакций с возбужденным атомарным кислородом продуцирует окислы азота, которые в каталитических реакциях разрушают стратосферный озон. Тем не менее, химическое разруше-

ние закиси азота в стратосфере не приводит к его значительному разрушению и химическое время жизни  $N_2O$  составляет 100–120 лет, что приводит к динамическому контролю его пространственно-временного распределения.

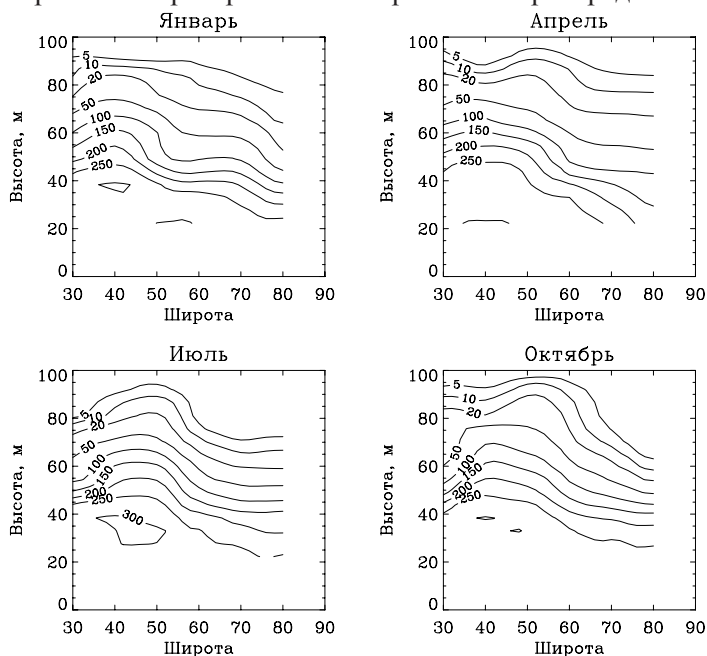


Рис. 3.5. Отношение смеси метана по результатам измерений

Все те же характерные черты в распределении отношения смеси, которые отмечались в высотно-широтных профилях метана, и которые объясняются особенностями циркуляционных процессов в приземном слое атмосферы, можно наблюдать и у закиси азота. В частности, отмечается и повышенное значение концентраций в южной части, сдвиг максимумов отношений смеси в летнее полушарие, выравнивание концентраций в полярных и умеренных широтах в зонах разрушения планетарных волн и более однородное широтное распределение закиси азота в верхней части приземного слоя в апреле и сентябре по сравнению с январем и июлем.

Химическое время жизни закиси азота в приземном слое атмосферы в три раза больше времени жизни метана, поэтому она в большей степени контролируется динамическими процессами и в меньшей – химией. Из-за этого в моделируемом распределении  $N_2O$  более заметны различия в той части, которая контролируется атмосферной циркуляцией.

По результатам моделирования распределения долгоживущих газов метана и закиси азота в приземном слое атмосферы и сравнения полученных высотно-широтных профилей с измерениями со спутника UARS, можно заключить, что использование данных о потоках химически активных примесей с подстилаю-

щей поверхности в атмосферу позволило хорошо качественно и, в значительной степени, количественно воспроизвести наблюдаемые особенности распределения  $\text{CH}_4$  и  $\text{N}_2\text{O}$ .

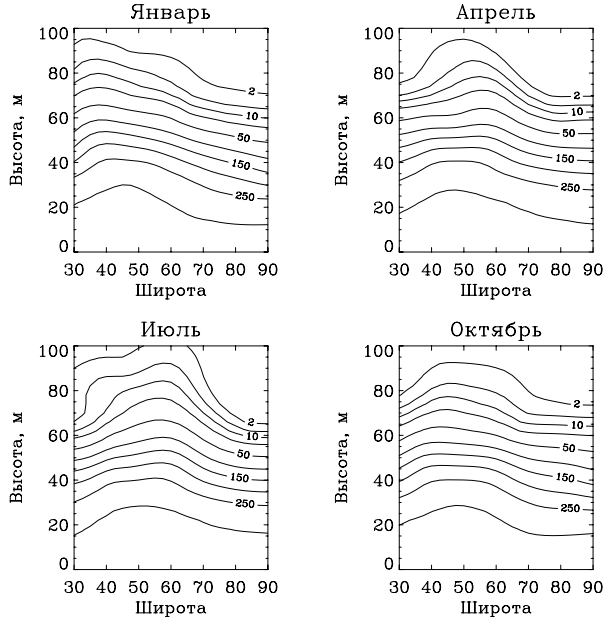


Рис. 3.6. Отношение смеси закиси азота по результатам моделирования

Сравнение результатов модельных расчетов с результатами измерений для озона и других газов показало, что модель правильно воспроизводит основные особенности их распределения в атмосфере и может быть использована для изучения особенностей химического взаимодействия между разными частями геосферы.

### Заключение

Описана разработанная модель химической трансформации в атмосфере продуктов поверхностных выбросов химически активных газов. Модель построена по конечно-разностной схеме и позволяет учесть взаимодействие и обратные связи между химическими процессами в приземном слое атмосферы и приповерхностном слое подстилающей поверхности. Обмен примесями между атмосферой и поверхностью осуществляется по потоковой схеме с учетом разницы между концентрациями в верхнем слое подстилающей поверхности и на нижнем уровне приземного слоя атмосферы.

Сравнение результатов модельных расчетов с результатами измерений для озона и других газов показало, что модель правильно воспроизводит основные особенности их распределения в атмосфере и может быть использована для изучения особенностей химического взаимодействия между разными частями геосферы.

**Литература**

1. Андруз Дж., Бримблекумб П., Джикелз Т., Лице П. Введение в химию окружающей среды / Пер с англ. – М.: Мир, 1999.
2. Vallero D. Fundamental of Air Pollution / D. Vallero // Academic Press. 2007, p. 77-80.
3. Jacob D.J. Introduction to Atmospheric Chemistry // Princeton Univ. Press. 1999, p.23-24.
4. Seinfeld J.H., Pandis S.N. Atmospheric Chemistry and Physics // Wiley Interscience. 1998, p. 22-26.
5. Stockwell W. R. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling / W. R. Stockwell, F. Kirchner, M. Kuhn // J. Geophys. Res., 102, 25,847-825,879. 1997, p. 20-21.
6. Фелленберг Г. Загрязнение природной среды. Введение в экологическую химию / Пер. с нем. – М.: Мир, 1997.
7. МакИвен М., Филлипс Л. Химия атмосферы. – М., 1978.
8. Baklanov A., Korsholm U., Mahura A., Petersen C., Gross A. Enviro-HIRLAM: on-line coupled modelling of urban meteorology and air pollution. *Advances in Science and Research*, 2, 41-46, 2008a.
9. Grell G.A., Knoche R., Peckham S.E., McKeen S. Online versus offline air quality modeling on cloud-resolving scales. *Geoph. Res. Let.*, 31, L16117, doi:10.1029/2004GL020175, 2004.
10. McElroy M.B., Wang Y.X. (2005), Human and animal wastes: Implications for atmospheric N<sub>2</sub>O and NO<sub>x</sub>, *Global Biogeochem. Cycles*, 19, GB2008, doi:10.1029/2004GB002429.
11. Cao M., Prince S.D., Shugart H.H. (2002), Increasing terrestrial carbon uptake from the 1980s to the 1990s with changes in climate and atmospheric CO<sub>2</sub>, *Global Biogeochem. Cycles*, 16(4), 1069, doi:10.1029/2001GB001553.
12. Greenhouse Gas Emissions and Climate Change // State of the Environment Report, 2008.
13. Grannas A.M., Shepson P.B., Filley T.R. (2004), Photochemistry and nature of organic matter in Arctic and Antarctic snow, *Global Biogeochem. Cycles*, 18, GB1006, doi:10.1029/2003GB002133.
14. Уорк К., Уорнер С. Загрязнение воздуха. Источники и контроль / Пер. с англ. – М., 1980.
15. Еланский Н.Ф. Российские исследования атмосферного озона в 1999–2002 гг. // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2004, т. 40, № 4, с. 587-596.
16. Еланский Н.Ф. Мониторинг атмосферы: вклад России // Наука в России. 2004. № 6, с. 20–26.
17. 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.
18. Эммануэль А.Б., Кнорре Р.Б. Основы химической кинетики. Наука. 1968. – 413 с.
19. Перов С.П., Хргиан А.Х. Современные проблемы атмосферного озона. – Л.: Гидрометеоздат, 1980. – 288 с.
20. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1971.
21. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. – М.: Мир, 1979. – 312 с.
22. Borghans J.A.M. Extending the quasi-steady state approximation by changing variables / J.A.M. Borghans, R.J. de Boer, L.A. Segel // Bull. Math. Biol. 1996. № 58, p. 43-63.
23. Kaminski T., Knorr W., Rayner P.J., Heimann M. (2002) Assimilating atmospheric data into a terrestrial biosphere model: A case study of the seasonal cycle, *Global Biogeochem. Cycles*, 16(4), 1066, doi:10.1029/2001GB001463.
24. Еланский Н., Вайсфлог Л., Пути Э. Природные пестициды // Наука в России. 2006. № 1, с. 19–22.
25. Меньшиков В.В., Швыряев А.А. Опасные химические объекты и техногенный риск: Уч. пос. – М.: Химия, фак-т Моск. ун-та, 2003.

Работа выполнена в Российском государственном гидрометеорологическом университете в рамках мероприятия 1.3.2 Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (государственный контракт № П1693 от 21 сентября 2009 г.) по направлению «Геохимия».