В.В. Осечкин, Е.В. Гниловской, В.Е. Потёмкин

ОПЫТ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФОРМАЛИЗАЦИИ НЕКОТОРЫХ УРАВНЕНИЙ АТМОСФЕРНОЙ ХИМИИ (ОЗОНОВОГО ЦИКЛА) НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ ВОЛЬТЕРРА

V.V. Osetchkin, E.V. Gnilovskoy, V.E. Potyomkin

AN ATTEMPT OF MATHEMATICAL FORMALIZATION OF THE ATMOSPHERIC CHEMISTRY EQUATIONS (OF THE OZONE CYCLE) BASED ON THE VOLTERRA'S THEORY

Один из выводов теории "борьбы за существование", созданной выдающимся итальянским математиком Вито Вольтерра, впервые применяется к формализации некоторых уравнений атмосферной химии (озонового цикла). Полученные авторами соотношения позволяют оценивать эффект накопления озона в нижней зимней ночной стратосфере (в условиях отсутствия солнечной ультрафиолетовой радиации).

Ключевые слова: стратоосферный озон, зимняя нижняя полярная стратоосфера, уравнения Вольтерра.

One of conclusions of the theory of "the struggle for an existence" developed by Vito Volterra, the famous Italian mathematician, is first used to formulize some of the atmospheric chemistry equations (of the ozone cycle). With the help of the relationships derived by the authors one may evaluate an effect of ozone accumulation in the lower polar stratosphere during the winter (when no solar ultraviolet radiation is in action).

Key words: stratospheric ozone; winter lower polar stratosphere; the Volterra's equations.

Статья является продолжением и в определенной степени развитием исследований авторов [В.В. Осечкин, 1989; 1993; 1997]. В упомянутых работах авторы обратили внимание на малоизученную особенность в вертикальном и географическом распределении озона. Эта особенность заключается в том, что весной в полярных широтах наблюдается максимум общего содержания озона, происхождение которого не в состоянии объяснить фотохимическая теория. В названных работах предложили физический механизм, объясняющий указанное явление.

Кратко напомним содержание предложенного механизма. Известно, что во время полярной ночи солнечная ультрафиолетовая радиация (УФР) отсутствует. Между тем от осени к весне в нижней ночной полярной стратосфере наблюдается увеличение общего содержания озона, что указывает на существование в нижней стратосфере источника озонообразования, отличного от фотохимического. Авторы считают, что единственным источником дополнительного образования озона в нижней стратосфере в указанный период является радиолиз молекулярного кислорода протонами галактических космических лучей (ГКЛ).

С помощью предложенного механизма можно объяснить не только природу весеннего механизма общего содержания озона в полярных и субполярных

регионах, но и происхождение вторичного максимума в вертикальном распределении плотности озона на высотах 13–16 км [Осечкин, 1997], расположенного ниже основного озонового максимума. Оценка величины дополнительного озонообразования проводилась с учетом структуры магнитного поля Земли и по лабораторным данным продуктивности озонообразования в системе $N_2 + O_2$ [Пикаев, 1985].

В настоящей работе на рассмотрение предлагается на рассмотрение новый метод математической формализации некоторых уравнений атмосферной химии применительно к процессу дополнительного озонообразования в нижней стратосфере в условиях зимней полярной ночи. Указанный метод представляет собой математическую аналогию одного из положений "теории борьбы за существование", созданной в начале 20-х годов XX века выдающимся итальянским математиком Вито Вольтерра [Вольтерра, 1976].

Первоначально теория была разработана для исследования взаимодействия биологических объектов (например, столкновения больших масс планктона с рыбными косяками и т.п.). Заметим попутно, что примерно в те же годы в нашей стране успешно развивал математические методы в биологии А.А. Любищев [Любищев, 1991]. Теория Вольтерра для изучения химических процессов до настоящего времени не применялась.

Рассмотрим изложенный ниже метод математической формализации уравнений, описывающих некоторые химические процессы в нижней озоносфере.

Представим некоторую популяцию, находящуюся в неизменной или медленно меняющейся среде. Тогда можно утверждать, что для короткого интервала времени dt число рождений и гибели отдельных индивидуумов (в нашем случае — молекул и атомов исследуемых газов) будет пропорционально их численности N в данный момент. Тогда прирост числа индивидуумов dN (в нашем случае увеличение концентраций газовых компонентов) будет пропорционален концентрации N и длине временного интервала dt (пока он невелик). Математически это можно записать следующим образом:

$$dN = \alpha N dt, \tag{1}$$

где a— коэффициент пропорциональности или, в терминах Вольтерра, коэффициент прироста популяции. После интегрирования (1) получаем:

$$N = N_0 e^{\alpha(t - t_0)}, \tag{2}$$

где N_0 — первоначальное количество индивидуумов; t_0 — начальный момент времени.

Уравнение (2) является законом развития видов и является экспоненциальным законом.

Если T — время, в течение которого численность индивидуумов увеличилась или уменьшилась в 2 раза, то можно записать $e^{\alpha T} = 2$, или, разрешая относительно α , получим:

$$\alpha = \pm \frac{0.694}{T},\tag{3}$$

где знак "+" означает прирост, или увеличение популяции, а знак "-" означает уменьшение популяции.

Если рассматривать N индивидуумов в одной среде, то для баланса i-го вида можно написать дифференциальное уравнение:

$$\frac{1}{N_i} \frac{dN_i}{dt} = f(N_1, N_2, ..., N_p), \tag{4}$$

Теперь перейдем непосредственно к химическим уравнениям озонового цикла. Для исследования метода Вольтерра ограничимся простейшим случаем – рассмотрением лишь двух реакций — озонообразования и озоноразрушения, считая при этом, что в нижней стратосфере в зимнее время в полярных районах постоянно присутствуют атомарный кислород, образующийся, как было сказано выше, в результате радиолиза молекулярного кислорода протонами ГКЛ. Эти реакции следующие:

$$O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M \tag{5}$$

$$O + O_3 \rightarrow 2O_2 \tag{6}$$

В терминах Вольтерра основные компоненты уравнений (5) и (6) называются видами, или индивидуумами. Следуя этой терминологии, принимаем, что атомарный кислород (O) является первым видом (или первым компонентом взаимодействия), молекулярный кислород (O_2) – вторым видом и озон (O_3) – третьим видом. Тогда в рассматриваемом случае уравнение (5), описывающее баланс атомов кислорода, будет выглядеть, согласно теории Вольтерра, следующим образом:

$$\beta_1 \frac{dN_1}{dt} = (\alpha_1 \beta_1 - a_{1,2} N_2 - a_{1,3} N_3) N_1, \tag{7}$$

где N_1 , N_2 , N_3 — концентрации атомарного кислорода, молекулярного кислорода и озона соответственно; α_1 — коэффициент прироста атомарного кислорода; β_1 — масса одной молекулы атомарного кислорода (массовое число); $a_{1,2}$ — коэффициент поглощения атомарного кислорода молекулярным кислородом.

Соответственно уравнения баланса для молекул кислорода и молекул озона будут иметь вид:

$$\beta_2 \frac{dN_2}{dt} = (-\alpha_2 \beta_2 - a_{2,3} N_3 + a_{1,2} N_1) N_2, \tag{8}$$

$$\beta_3 \frac{dN_3}{dt} = (-\alpha_3 \beta_3 + a_{2,3} N_2 + a_{1,3} N_1) N_3.$$
 (9)

Таким образом, соотношения (7), (8) и (9) представляют систему искомых уравнений, которые описывают процесс озонообразования и озоноразрушения для указанных выше условий, или, в терминах Вольтерра – процессы прироста и гибели соответствующих видов.

Рассмотрим уравнения (7), (8) и (9). Для получения первого интеграла введем следующие обозначения: $a_{2,3} = k_1$, $a_{1,2} = k_3$. Умножим уравнение (7) на k_1 , а уравнение (9) на k_3 и сложим эти уравнения. Тогда после интегрирования получим:

$$\beta_3 k_3 \log N_3 + \beta_1 k_1 \log N_1 = \left[-\alpha_3 \beta_3 k_3 + \alpha_1 \beta_1 k_1 + (N_1 - N_3) a_{1,3} \right] t \quad (10)$$

После потенцирования имеем:

$$N_3^{\beta_3 k_3} N_1^{\beta_1 k_1} = C e^{\alpha \beta_{11} k_1} e^{-\alpha_3 \beta_3 k_3} e^{a_{1,3} (N_1 - N_3)t}$$
(11)

Выражение (11) наглядно показывает, что главным фактором дополнительного озонообразования в условиях полярной ночи в нижней стратосфере является присутствие атомарного кислорода и его количество. Вторым условием дополнительного озонообразования является неравенство (α_1 β_1)/ k_3 > (α_3 β_3)/ k_1 , что также следует из соотношения (11).

Объективности ради следовало бы сравнить результаты вычислений по формуле (11) с эффектом накопления озона за полярную ночь в нижней стратосфере, полученным ранее авторами [Осечкин, 1989]. Однако такое сопоставление выходит за рамки настоящего исследования и будет представлено в нашей следующей работе.

Литература

- 1. Вольтерра В. Теория борьбы за существование. М.: Наука, 1976. 350 с.
- 2. *Любищев А.А.* В защиту науки. Л.: Наука, 1991. 295 с.
- 3. Осечкин В.В., Гниловской Е.В., Кондратович К.В. О воздействии галактических космических лучей на формирование весеннего максимума общего содержания озона в полярных и субполярных районах // ДАН, 1989, т. 305, № 4, с. 825–828.
- 4. Осечкин В.В., Смышляев С.П. Механизм образования и разрушения вторичного максимума в вертикальном распределении плотности озона в нижней полярной стратосфере // ДАН, 1993, т. 328, с. 671–673.
- 5. Осечкин В.В., Гниловской Е.В. О природе нефотохимического источника озона в стратосфере и возможности его географической интерпретации // ДАН, 1997, т. 355, № 4, с. 535–539.
- 6. Пикаев А.К. Современная радиационная химия. М.: Наука, 1985. 374 с.