

Н.А. Лаврентьев, О.Б. Родимова, А.З. Фазлиев

Проведение вычислений в информационно-вычислительной системе «Атмосферная химия»

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 21.03.2005 г.

Информационно-вычислительная система (ИВС) «Атмосферная химия» предназначена для исследования сосредоточенных систем, динамическое поведение которых определяется кинетическими уравнениями. Основными параметрами исследуемой атмосферной химической системы в ИВС являются модель атмосферы, альbedo поверхности и зенитный угол. К числу решаемых задач относятся расчет коэффициентов скорости фотохимических реакций на заданной высоте в атмосфере или при заданном потоке излучения, вывод кинетических уравнений и интегралов движения для них по заданному набору реакций, определение концентраций компонентов атмосферы в зависимости от времени и т.д. Для цикла Чепмена и кислородно-водородной атмосферы проведены тестовые расчеты, результаты которых качественно совпадают с расчетами, выполненными ранее [1, 2].

Введение

Представление в Интернете информационных ресурсов и программ, ориентированных на расчеты в области атмосферной химии, появилось практически сразу с появлением «всемирной паутины». На сайтах и ftp можно найти множество файлов с описанием химических процессов в атмосфере и программ для решения ряда задач, характерных для данной предметной области. Ниже представлен краткий обзор существующих информационных ресурсов, связанных с проблемами атмосферной химии, и описан созданный нами ресурс. Результаты моделирования двух химических систем, полученных в рамках информационно-вычислительной системы (ИВС) «Атмосферная химия», сравнены с решениями этих же задач, приведенными в работах [1, 2].

Типичными для атмосферной химии задачами являются задачи определения динамики концентраций вещественных компонентов атмосферы. Факторами, влияющими на изменения, могут быть не только химические процессы и солнечное излучение в атмосфере, но и динамические процессы, обуславливающие перенос воздушных масс, конвекция и т.д. Эти задачи решались многими авторами. Созданы программные средства, такие как, например, ASAD: Chemical Modelling Software [3] для вывода кинетических уравнений в рамках подхода семейств реакций, Chemistry Tool Kit [4] для организации и отображения данных, пакет программ SLIMCAT [5], описывающий трехмерную модель переноса, параметрами которой могут быть данные из трехмерной глобальной климатической модели, программа TOMCAT [6], являющаяся трехмерной моделью переноса химических компонентов, связанной с данны-

ми ECMWF. Последняя модель интегрирует схему тропосферной химии, включающую около 50 примесей. Более полное описание программных ресурсов и данных можно найти в ИВС «Атмосферная химия» в разделе ссылок на ресурсы [7].

Описанные выше программные и информационные ресурсы, как правило, организованы в виде набора файлов или кодов программ, которые пользователь должен установить на своем рабочем месте. Иной подход к предоставлению пользователю возможности работы, как с информационными ресурсами, так и программами, осуществляется в рамках информационно-вычислительной системы. Необходимость создания информационно-вычислительных систем, доступных в сети Интернет, диктуется развитием современной инфраструктуры науки. Видение того, как компьютеры и информационные технологии поддерживают и усиливают научный процесс, получило несколько названий (Grid, e-Science и др. [8]). С технологической точки зрения в рамках этих подходов и стоит рассматривать представляемую работу.

ИВС «Атмосферная химия» прошла несколько этапов развития [9–14]. Первоначально ИВС была клиентской, в виде отдельного исполняемого файла, написанного на языке Visual Basic. Данные для системы хранились в формате таблиц Microsoft Excel. На основе выбранных реакций в оболочке строилась система кинетических уравнений, после чего пользователем задавались условия для решения системы. Конечным результатом ее работы была программа [9] для интерпретатора Mathematica 3.0, в рамках которого пользователь мог проводить анализ кинетических уравнений. Отметим, что аналогичный подход был реализован в работе [15].

Следующая версия ИВС [10, 11] была серверной и включала в себя модуль постановки и решения задач о динамике атмосферных химических компонентов. Для хранения данных в ней использовалась СУБД Interbase для ОС Linux. Веб-интерфейс пользователя для работы с данными был основан на диалоговой системе, при построении которой использовались технологии CGI и SSI. Организация данных во второй версии имела некоторые недостатки. Основным из них была недостаточная структурированность данных: так, вещества, участвующие в реакциях, хранились в символьном виде, не имея внутренней химической структуры, что затрудняло анализ химического состава вещества, необходимый при построении стехиометрических матриц на этапе вывода кинетических уравнений. Отсутствовали инструменты для работы с ионами и изотопами веществ. Кроме того, не было возможности занесения пользователем своих реакций и относящейся к ним информации, что ограничивало возможности пользователя при работе с данными в модуле выбора реакций.

Перечисленные недостатки были устранены в новой версии сайта по атмосферной химии, реализованной в рамках проекта INTAS по созданию портала по атмосферным наукам [12–14, 16]. Информационно-вычислительная система «Атмосферная химия» является интерактивной системой для анализа атмосферных химических процессов в рамках ящичной (боксовой) модели. В ее рамках пользователь может поставить задачу и провести ее количественный анализ.

Основными частями ИВС являются следующие модули.

1. Модуль выбора химических реакций.
2. Модуль выбора физических условий (высоты в атмосфере, альbedo и т.д.).
3. Модуль вывода системы кинетических уравнений.
4. Модуль постановки и решения задач о динамике атмосферных химических компонентов.

Ресурс предназначен для той категории пользователей, которая нуждается в количественной информации о кинетике химических процессов, протекающих в атмосфере.

Статическая часть информационного ресурса доступна всем пользователям в сети Интернет. Динамическая часть ресурса, создаваемая пользователем при решении поставленных им задач, доступна только пользователю. Для реализации возможности решения задач пользователь должен зарегистрироваться в портале АТМОС (<http://atmos.iao.ru/>). Процедура регистрации предназначена для резервирования ресурсов ИВС за идентифицированными пользователями. После регистрации пользователь может создавать собственные ресурсы: молекулы, изотопы, ионы, составлять из них реакции, заносить коэффициенты скорости реакций, статистические модели атмосферы и т.д.

1. Постановка задачи в ИВС «Атмосферная химия»

1.1. Работа с данными

Моделирование химических процессов, происходящих в атмосфере, требует правильной организации данных о веществе, о химических реакциях, в которых они участвуют, и о среде, в которой происходят процессы химической трансформации веществ. Подробное описание базы данных можно найти в монографии [1].

Работа с данными состоит из двух этапов. К первому из них относится формирование реакции пользователем, в том случае когда требуемая ему реакция отсутствует в ИВС или необходимо изменение коэффициента скорости реакции уже имеющейся в БД, а ко второму — их выбор для дальнейшего анализа в рамках кинетической теории. Детальное описание этих этапов работы можно найти в справке по ИВС «Атмосферная химия».

При работе с данными используются следующие операции с предметными сущностями.

1. Занесение и удаление атомов, ионов и изотопов.
2. Составление молекул из атомов и удаление молекул.
3. Формирование структуры физико-химических свойств веществ.
4. Формирование циклов химических реакций в атмосфере.
5. Занесение, удаление и модификация реакций и циклов.

Выбор реакций пользователем осуществляется из базы данных по химическим реакциям (в настоящее время доступны данные о химических реакциях в атмосфере из АСМСU [17], о стратосферных реакциях, представленных в работе [18, 19], а также о реакциях из монографии [20]). Выбор может осуществляться по типу реакции (бимолекулярные, тримолекулярные, фотолизные) или по указанию вещества (выбор среди всех реакций в базе данных). Реакции любого типа можно объединять в циклы, для их хранения создана отдельная таблица, в которой хранятся ссылки на реакции, собранные в цикл.

1.2. Задание физических условий

Для определения внешних условий, в которых исследуется набор реакций, выбранных пользователем, создан интерфейс, позволяющий моделировать две ситуации — протекание реакции на заданной высоте в атмосфере и в условиях, определяемых пользователем, а именно: при задании температуры и спектральной зависимости интенсивности излучения, воздействующего на химическую систему.

Спектральная зависимость интенсивности излучения определяется моделируемой ситуацией. Для лазерных источников излучения достаточно задать тип лазера и его спектральные характеристики. При моделировании процесса в атмосфере и задании

высоты, на которой проводится расчет коэффициента реакции, интенсивность излучения рассчитывается в рамках подхода Чоу и Ли [21] с помощью данных статистической модели атмосферы [22].

1.3. Построение кинетических уравнений

Основой для количественного анализа поведения химических систем в атмосфере являются кинетические уравнения, генерируемые в ИВС для заданного пользователем набора химических реакций и/или циклов реакций. Построение кинетических уравнений предполагает задание пользователем типа химической системы. Для открытых систем предоставлена возможность включения в набор реакций неполных реакций (реакций, в которых известны реагенты, но неизвестны продукты) или источников и стоков. После вывода кинетических уравнений в ИВС можно найти законы сохранения (если таковые имеются), рассчитать коэффициенты скорости реакций (наиболее сложен расчет скорости фотолизной реакции, требующий задания атмосферных условий или спектральной зависимости интенсивности излучения). При наличии законов сохранения можно по выбору пользователя исключить ряд переменных из рассмотрения, редуцировав число анализируемых нелинейных дифференциальных уравнений. На этапе построения уравнений определяются значения коэффициентов скорости реакций по заданной пользователем модельной ситуации.

2. Решение задач в ИВС

2.1. Решение кинетических уравнений

Исследование и решение кинетических уравнений проводятся численно. Для решения дифференциальных уравнений используется пакет программ Sundials [23], разработанных на основе метода Ньютона–Крылова. Вычислительная процедура, реализованная в нем, требует задания абсолютной и относительной точности вычислений. Входными данными для пакета являются кинетические уравнения, интервал времени, на котором ищется решение, наборы начальных условий и число точек, характеризующее детали временного изменения химических компонентов в решении. Интерфейс для ввода данных, как правило, представляет собой таблицу с набором форм для ввода данных. К числу выходных данных относятся получаемые решения и диагностика пакета программ Sundials, содержащая в себе информацию об общем числе шагов, общем числе вызовов применяемой при расчете функции, полном числе вызовов, сделанных процедурами Sundials, числом оценок якобиана, числом нелинейных итераций, числом произошедших нелинейных расхождений и т.д.

В этом разделе мы приведем примеры использования имеющихся в системе возможностей для двух наборов химических реакций, описанных в литературе.

Хорошо известно, что необходимой составной частью фотохимических моделей атмосферы является цикл образования озона. Основные химические процессы, приводящие к образованию и разрушению озона, были впервые рассмотрены Чепменом в 1930 г. [24] и включали фотохимические реакции между кислородными составляющими.

Качественный анализ системы уравнений, предложенных Чепменом для кислородной атмосферы, был систематизирован в [1]. Проведенная полная классификация состояний системы реакций в кислородной атмосфере, рассматриваемой как нелинейная замкнутая консервативная система, выявляет следующие особенности, присущие системе реакций между кислородными составляющими. С одной стороны, она является в высокой степени нелинейной, обнаруживая такие характерные для этой системы черты, как наличие множественных стационарных состояний и изменение их числа и характера устойчивости при изменении параметров системы. С другой стороны, эти черты, совершенно явные для определенных наборов реакций из рассматриваемого списка, как бы замыкаются при принятии во внимание всех возможных реакций. Особую роль в исчезновении проявлений нелинейности играют реакции рекомбинации атомарного кислорода.

В качестве примеров для демонстрации работы системы выбраны две задачи: упрощенный цикл Чепмена [1] и кислородно-водородная система [2].

2.2. Замкнутая система. Система с реакцией фотодиссоциации молекулярного кислорода

Этот случай включает три реакции (см. ниже): фотодиссоциация молекулярного кислорода (1), возникновение озона в трехчастичном столкновении (2) и разрушение озона при столкновении с атомом кислорода (3). В качестве третьей частицы в реакции образования озона выступает молекула кислорода. Среди наборов реакций в кислородной атмосфере этот набор является самым богатым по структуре фазового портрета. В треугольнике реакций (ТР) имеется 4 стационарных состояния, два в вершинах и два внутри, причем два из них устойчивые (рис. 1,а).

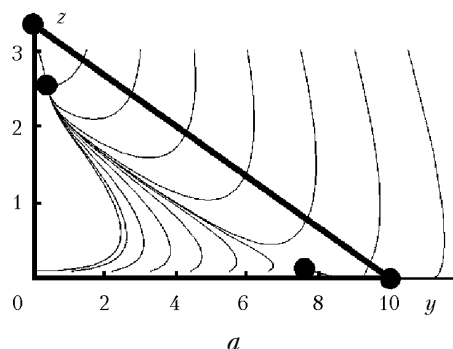
В зависимости от начальных условий система эволюционирует либо к одному, либо к другому состоянию. Если обозначить концентрации кислородных составляющих O_2 , O , O_3 через x , y , z соответственно, закон сохранения имеет вид

$$2x + y + 3z = A$$

и фазовый портрет системы может быть изображен на плоскости любых двух переменных.

При изменении величины A качественная картина в пределах треугольника реакций меняется, а именно: остаются два стационарных состояния, из которых устойчивым является состояние с нулевой концентрацией озона (рис. 1,б).

$J_2, K_1, K_8, \quad A = 10$
 вершина $y = A, z = 0$ – устойчивый узел;
 вершина $y = 0, z = A/3$ – седло;
 два стационарных состояния
 внутри ТР – устойчивый узел и седло.



$J_2, K_1, K_8, \quad A = 1$
 вершина $y = A, z = 0$ – устойчивый узел;
 вершина $y = 0, z = A/3$ – седло.

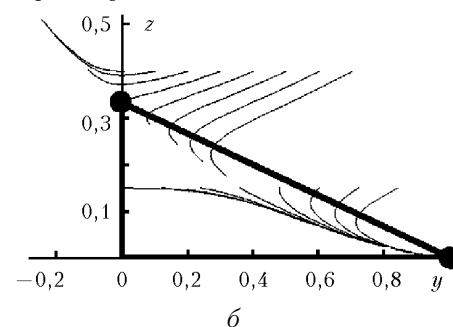
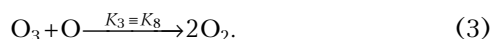
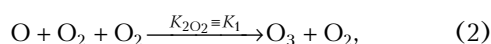
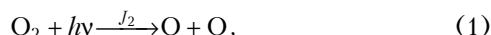


Рис. 1. Фазовые портреты для системы реакций (1)–(3)

Отметим, что для наглядности фазовые портреты на рис. 1 получены с помощью масштабного преобразования ($y/10^{17}, z/10^{17}$). Бифуркационное значение A находится между значениями, для которых приведены фазовые портреты:



Рассмотрим, каким образом аналогичную информацию можно получить в описываемой информационной системе «Атмосферная химия».

Отметим особенность рассматриваемого случая, заключающуюся в том, что в базе реакций ИВС отсутствует реакция фотодиссоциации молекулярного кислорода в том виде, как она представлена в (1). Она была введена в базу данных реакций ИВС пользователем, как предусматривается возможностями системы.

Ниже показан перечень реакций и источники данных, из которых извлекается информация о скорости реакции:

Реакция	Источник
$\text{O}_3 + \text{O} \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}_2$	JPL NASA-14
$\text{O}_2 + \text{O}_2 + \text{O} \rightarrow \text{O}_3 + \text{O}_2$	IUPAC-2002
$\text{O}_2 + \text{photon} \rightarrow \text{O} + \text{O}$	User-defined

Для вычисления коэффициентов скорости реакций были выбраны условия из модели США [22], соответствующие высоте 1 км для лета умеренных широт.

Стационарные состояния с положительными координатами, найденные вне ИВС, приведены в табл. 1.

Таблица 1

Координаты стационарных состояний системы реакций (1)–(3)

Номер состояния	O_2	O	O_3
1	$7,25378 \cdot 10^{16}$	399,814	$4,41486 \cdot 10^{14}$
2	0,0	$1,464 \cdot 10^{17}$	0,0
3	0,0	0,0	$4,88 \cdot 10^{16}$
4	192,0	$1,464 \cdot 10^{17}$	$3,09193 \cdot 10^{-15}$

Состояние 1, расположенное внутри ТР, является устойчивым узлом. Состояния 2 и 3 находятся в вершинах ТР и, являясь устойчивым узлом и седлом, отвечают наличию только молекулярного кислорода и только озона соответственно. Состояние 4, седло, практически сливается с состоянием 2, образуя седло-узел. Картина стационарных состояний аналогична изображенной на рис. 1,а. В рамках ИВС координаты состояния 1 находятся как предельные концентрации при достаточно большом времени решения. Координаты неустойчивых состояний таким способом не могут быть найдены.

Задание различных наборов начальных условий позволяет построить фазовые портреты в окрестностях тех или иных стационарных состояний. Вариант, приведенный ниже, показывает картину фазовых траекторий, характерную для большей части ТР, а именно: стремление фазовых траекторий к устойчивому узлу 1, расположенному вблизи вершины $[\text{O}_3] = A/3$, причем сначала траектории приближаются к сепаратрисе седла 4 (рис. 2,а). Численное исследование задачи сводится к решению кинетических уравнений в окрестностях данных точек. Задание начальных концентраций для анализа окрестности первой стационарной точки показано в табл. 2.

Таблица 2

Начальные концентрации для вариантов решения системы (1)–(3), представленных на рис. 2

№ варианта	Высота 1 км				Высота 30 км	
	(рис. 2,а)		(рис. 2,б)		(рис. 2,в)	
	O	O_3	O	O_3	O	O_3
1	10^{16}	10^{15}	200	$5 \cdot 10^{14}$	10^9	10^8
2	$4 \cdot 10^{16}$	10^{15}	300	$5 \cdot 10^{14}$	10^{10}	10^8
3	$7 \cdot 10^{16}$	10^{15}	400	$5 \cdot 10^{14}$	10^{11}	10^8
4	10^{17}	10^{15}	500	$5 \cdot 10^{14}$	10^{12}	10^8
5	10^{16}	10^{14}	200	$4 \cdot 10^{14}$	10^9	10^4
6	$4 \cdot 10^{16}$	10^{14}	300	$4 \cdot 10^{14}$	10^{10}	10^4
7	$7 \cdot 10^{16}$	10^{14}	400	$4 \cdot 10^{14}$	10^{11}	10^4
8	10^{17}	10^{14}	500	$4 \cdot 10^{14}$	10^{12}	10^4

Из рис. 2,а видно, что при $A = 10^{12}$ фазовые траектории, начинающиеся в разных областях ТР, стремятся к вершине ($[O_3] = 0$, $[O] = A$), являющейся в данном случае единственным устойчивым стационарным состоянием (ср. рис. 1,б).

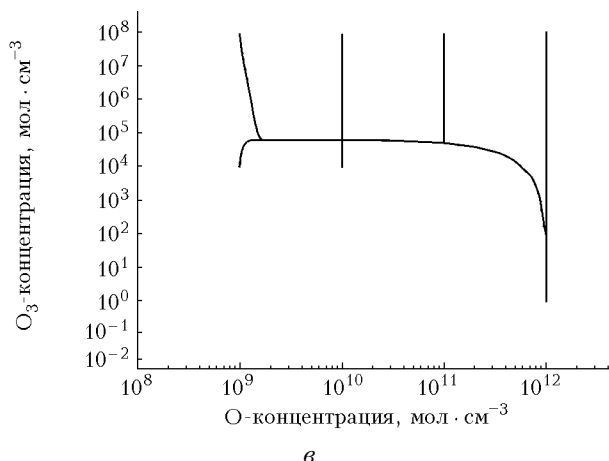
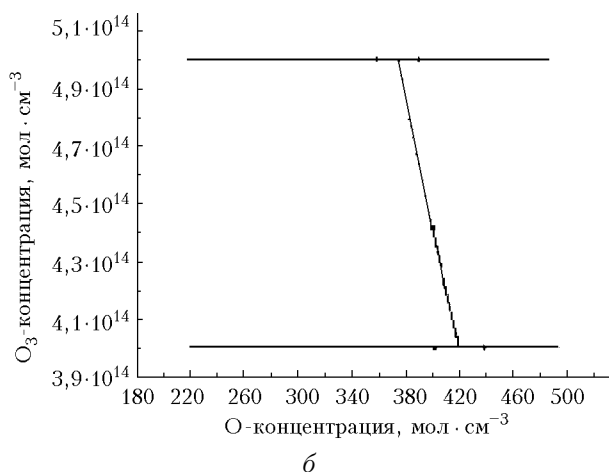
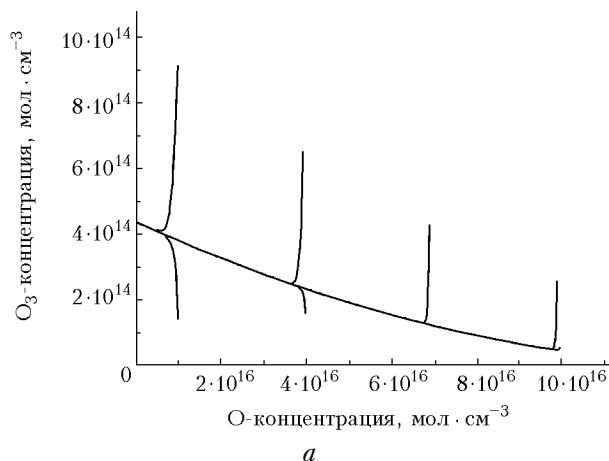


Рис. 2. Фазовые портреты системы (1)–(3) в разных областях фазового пространства; (а, б) $A = 1,464 \cdot 10^{17}$; стремление траекторий к устойчивому узлу 1 вдоль сепаратрисы седла 4 (см. табл. 1), показанное в разных масштабах; (в) $A = 10^{12}$; Стремление траекторий к устойчивому узлу в вершине ТР с наличием только атомарного кислорода

2.3. Открытые системы. Кислородно-водородная система

В работе [2] предложена модель, описывающая кислородно-водородную систему, характерную для мезосферы. В ней имеются 14 химических и фотохимических реакций, дополненных источником водяного пара в мезосфере и стоками атомарного водорода и молекулярного водорода и кислорода. Только два из этих параметров (k_H и f) предполагались независимыми, взаимосвязь между ними и остальными параметрами представлена в табл. 3.

Таблица 3

Параметры источников и стоков, дополняющих кислородно-водородную систему реакций, приведенную в табл. 4

Вещество	Сток, c^{-1}	Источник, $cm^{-3} \cdot c^{-1}$
[H]	k_H	
[H ₂]	$k_{H_2} = C k_H$	
[H ₂ O]		$F = 2f$
[O ₂]	$k_{O_2} = f/10^4$	

Пространство параметров (k_H , f) разделяется на подпространства, в которых система имеет разное число стационарных состояний — от 0 до 3. Для $k_H = 10^{-6} c^{-1}$ и при изменении $\text{Log } f$ от 0 до 5 попадаем в область наличия трех стационарных состояний, т.е. заданному значению f отвечают три значения концентраций, например O_3 в [2, рис. 5].

Чтобы воспроизвести эту ситуацию в рамках системы «Атмосферная химия», мы выбрали атмосферные условия на высоте 75 км.

Этот выбор приводит к скоростям рассматриваемых реакций, показанным в табл. 4.

Таблица 4

Скорости реакций кислородно-водородной системы на высоте 75 км

Бимолекулярные реакции	Коэффициент скорости реакции
$O_3 + O \rightarrow O_2 + O_2$	$2,192 \cdot 10^{-16}$
$OH + O \rightarrow O_2 + H$	$4,057 \cdot 10^{-11}$
$HO_2 + O \rightarrow OH + O_2$	$8,319 \cdot 10^{-11}$
$O_3 + H \rightarrow OH + O_2$	$1,274 \cdot 10^{-11}$
$HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$	$5,600 \cdot 10^{-12}$
$HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	$7,200 \cdot 10^{-11}$
$OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$	$2,047 \cdot 10^{-16}$
$HO_2 + OH \rightarrow O_2 + H_2O$	$1,718 \cdot 10^{-10}$
$HO_2 + H \rightarrow H_2O + O$	$2,192 \cdot 10^{-16}$
Тримолекулярные реакции	
$N_2 + O_2 + O \rightarrow N_2 + O_3$	$2,163 \cdot 10^{-34}$
$N_2 + O_2 + H \rightarrow HO_2 + N_2$	$2,887 \cdot 10^{-32}$
Фотолизные реакции	
$O_3 + \text{photon} \rightarrow O_2 + O$	0,0949
$H_2O + \text{photon} \rightarrow OH + H$	0,0002
$O_2 + \text{photon} \rightarrow O + O$	$1,035 \cdot 10^{-8}$

Далее, задавая начальные условия и значения (k_H , f), мы находили стационарные концентрации участвующих веществ по значениям предельных концентраций при достаточно большом времени

решения, что давало одну точку на графике зависимости $\text{Log } O_3$ от $\text{Log } f$ (рис. 3).

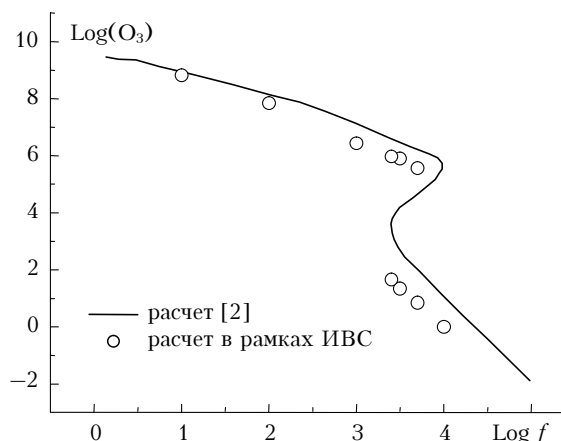


Рис. 3. Сравнение результата расчета в ИВС с расчетом [2]

Для получения точек на верхней и нижней «ветвях» кривой были использованы два варианта начальных условий (табл. 5).

Таблица 5
Начальные значения концентраций, использованные при расчете поведения кислородно-водородной системы в зависимости от параметров источников и стоков

№ варианта	H	H ₂	H ₂ O	HO ₂	O	O ₂	O ₃	OH
1	10 ⁷	10 ⁸	10 ⁹	10 ⁶	10 ⁹	10 ¹⁴	10 ⁸	10 ⁶
2	4 · 10 ¹⁰	2,8 · 10 ⁸	4,69 · 10 ¹¹	3,56 · 10 ⁵	3,76 · 10 ⁴	10 ¹⁴	1	1,38

Если учесть, что скорости реакций в наших вычислениях и вычислениях в [2] имеют ряд отличий, согласие результатов, в особенности наличие множественных стационарных состояний, можно считать удовлетворительным.

Заключение

В работе описана ИВС «Атмосферная химия», позволяющая поставить задачу анализа поведения концентраций компонентов сосредоточенной химической системы в заданных пользователем физических условиях.

ИВС обладает рядом вспомогательных сервисов, позволяющих, например, в разделе «Базы данных» дополнять систему данными о веществах и реакциях, в которых они участвуют. В разделе «Реакции» можно получить информацию об атмосферных химических реакциях и создавать произвольные наборы реакций для их дальнейшего исследования. В разделе «Среда» разными способами можно задавать внешние для химической системы атмосферные или иные условия, такие как температура, спектральный ход интенсивности излучения и т.д. Вывод кинетических уравнений для открытых или замкнутых химических систем проводится в разделе «Кинетика». В этом же разделе можно найти законы сохранения (если таковые имеются) и рассчитать коэффициенты скорости реакций. В разделе «Анализ» проводится численное решение сгенерированных

кинетических уравнений. Для решения дифференциальных уравнений использован пакет программ Sundials. Результаты вычислений могут быть представлены как в табличной, так и в графической формах.

Отметим некоторые технические средства, использованные для создания ИВС. Для реализации баз данных выбрана свободно распространяемая СУБД MySQL. С помощью языка скриптов PHP также выполняются вызовы SQL-запросов для манипуляций с базой данных, построение динамических страниц пользовательского и административного интерфейса, передача и обработка данных. В качестве веб-сервера был использован сервер Apache. Такой набор инструментальных средств доступен как на Windows, так и на Linux-платформах, что обеспечивает функционирование системы на серверах под управлением любой из этих операционных систем.

Авторы благодарны фонду INTAS за финансирование работы в рамках гранта 00-189 и профессору Е.П. Гордову за плодотворное сотрудничество.

1. Гордов Е.П., Родимова О.Б., Фазлиев А.З. Атмосферно-оптические процессы: простые нелинейные модели. Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2002. 248 с.
2. Yang P., Brasseur G.P. Dynamics of the oxygen-hydrogen system in the mesosphere. I. Photochemical equilibria and catastrophe // J. Geophys. Res. D. 1994. V. 99. N 10. P. 20955–20965.
3. <http://www.atm.ch.cam.ac.uk/acmsu/asad/>
4. <http://www.ccl.net/caa/software/MS-WIN95-NT/chemtk/>
5. <http://www.atm.ch.cam.ac.uk/~strat-mod/>
6. http://www.atm.ch.cam.ac.uk/~trop-mod/trop_models.html
7. <http://atchem.atmos.iao.ru/services/links>
8. De Roure D., Jennings N., Shadbolt N. A Future e-Science Infrastructure // Report commissioned for EPSRC/DTI Core e-Science Programme, 2001. 78 p.
9. Гордов Е.П., Карпов В.С., Лаврентьев Н.А., Родимова О.Б., Фазлиев А.З. Программная оболочка для решения задач атмосферной химии // Оптика атмосф. и океана. 1997. Т. 10. № 9. С. 1078–1086.
10. Fazliev A.Z., Karyakin A.S. Atmospheric chemistry database: structure, interface and applications // Proc. SPIE. 1999. V. 3983. P. 635–631.
11. Adamov D.P., Akhlyostin A.Yu., Fazliev A.Z., Gordov E.P., Karyakin A.S., Mikhailov S.A., Rodimova O.V. Information-computational system: atmospheric chemistry // Proc. SPIE. 1999. V. 3983. P. 578–581.
12. Лаврентьев Н.А., Фазлиев А.З. Представление данных об атмосферных химических реакциях в Интернете (<http://www.ict.nsc.ru/ws/elpub2002/4375/>).
13. Фазлиев А.З., Лаврентьев Н.А. База данных атмосферных химических реакций // Тр. Междунар.

- конф. «Enviromis 2002». Томск: ЦНТИ, 2002. Р. 24–27.
14. *Ахлестин А.Ю., Лаврентьев Н.А., Фазлиев А.З.* Информационные ресурсы по атмосферной химии // Тр. 5 Всерос. конф. «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции». СПб., 29–31 октября 2003. С. 257–262.
 15. *Holmes M.H., Au Y., Stayman J.W.* Symbolic and numeric computing for chemical reaction schemes // *Comput. Phys.* 1995. V. 9. N 6. P. 629.
 16. *Ахлестин А.Ю., Гордов Е.П., ДеРуддер А., Крутиков В.А., Лыкосов В.Н., Михалев А.В., Фазлиев А.З., Федра К.* Интернет портал о свойствах атмосферы. Структура и технологии // Тр. Всерос. конф. «Математические и информационные технологии в энергетике, экономике и экологии». Ч. 2. Иркутск, 2003. С. 247–254.
 17. *Atkinson R., Baulch D.L., Cox R.A., Hampson R.F., Kerr J.A., Jr., Rossi M.J., Troj J.* Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry: Supplement VII, IUPAC Subcommittee on Gas Kinetic Data Evaluation for Atmospheric Chemistry // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1999. V. 28. P. 191–393.
 18. *DeMore W.B., Sander S.P., Golden D.M., Hampson R.F., Kurylo M.J., Howard C.J., Ravishankara A.R., Kolb C.E., Molina M.J.* Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling // NASA Panel for Data Evaluation. Evaluation Number 12. JPL Publication 97–4. 1997.
 19. *Sander S.P., Friedl R.R., Golden D.M., Kurylo M.J., Huie R.E., Orkin V.L., Moortgat G.K., Ravishankara A.R., Kolb C.E., Molina M.J., Finlayson-Pitts J.* Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling // NASA Panel for Data Evaluation. Evaluation Number 14. JPL Publication 02–25. 2003.
 20. *Seinfeld J.H., Pandis S.N.* Atmospheric Chemistry and Physics. New York: John Wiley & Sons, 1998. 1326 p.
 21. *Chou M.-D., Lee K.T.* Parametrizations for the absorption of solar radiation by water vapor and ozone // *J. Atmos. Sci.* 1996. V. 53. N 8. P. 1203–1208.
 22. *Anderson G., Clough S., Kneizys F., Chetwynd J., and Shettle E.* AFGL «Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km)» // Air Force Geophysical Laboratory. AFGL-TR-86-0110. Environ. Res. Paper N 954. 1986.
 23. <http://www.llnl.gov/CASC/sundials>
 24. *Chapman S.* On ozone and atomic oxygen in the upper atmosphere // *Phil. Mag. Ser. 7.* 1930. V. 10. N 64. P. 369–383.

N.A. Lavrent'ev, O.B. Rodimova, A.Z. Fazliev. **Computing in the information-computational system «Atmospheric Chemistry».**

The information-computational system (ICS) «Atmospheric Chemistry» is intended for the analysis of the concentrated systems, whose dynamical behavior is defined by the kinetic equations. The basic parameters for the analyzed atmospheric chemical system in the ICS are the atmospheric model, surface albedo and zenith angle. The problems solved include the calculation of rate coefficients of photochemical reactions at a given height in the atmosphere or with the given radiation flux, derivation of kinetic equations and integrals of motion based on the given reactions set, determination of concentrations of time-dependent components etc. For the Chapman cycle and oxygen-hydrogen atmosphere, test calculations were carried out, the result of which qualitatively coincide with the earlier calculations [1, 2].