В.К. Аргучинцев, В.Л. Макухин

Численное моделирование распространения, трансформации и осаждения соединений серы, азота и углерода в регионе оз. Байкал

Иркутский государственный университет, Лимнологический институт СО РАН, г. Иркутск

Поступила в редакцию 27.11.2001 г.

С помощью численного решения полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии примеси выполнены оценки массы кислот, попадающих из атмосферы на оз. Байкал и прибрежные территории за год.

Одна из острейших глобальных проблем современности связана с повышением кислотности атмосферных осадков и почвенного покрова. Кислотные дожди возникают в результате хозяйственной деятельности человека, сопровождающейся эмиссией оксидов серы, азота, углерода при сжигании сланцев, нефти, углей, газа. Эти соединения, поступая в атмосферу, переносятся на большие расстояния, взаимодействуют с водой и превращаются в растворы смеси органических и неорганических кислот, которые, выпалая с осалками, оказывают отрицательное воздействие на наземную и водную экосистемы. Кислые осадки наблюдались в США, Великобритании, Германии, Голландии, Дании, странах Скандинавии, на территории других европейских государств, в Подмосковье, на северо-западе России. В последние годы проблема выпадения кислых осадков приобрела актуальность и в азиатской части нашей страны, о чем свидетельствуют результаты инструментальных исследований [1,2].

Данная работа является продолжением изучения процессов распространения, трансформации и осаждения соединений серы и азота в регионе оз. Байкал с помощью математической модели, начатого в [3-6]. Здесь уделяется внимание анализу зависимости плотности массового расхода осаждающихся на поверхность озера кислот от влажности атмосферы. Источниками выбросов оксидов серы и азота являлись промышленные предприятия 25 городов и поселков, в основном расположенных в непосредственной близости к Байкалу (наиболее крупные из них – Слюдянка, Байкальск, Нижнеангарск, Северобайкальск), а также удаленных от береговой линии на расстояния до 70 км (Иркутск, Шелехов, Селенгинск, Каменск). Величины массового расхода диоксидов серы и азота были определены на основе работ [7-11]. Статистические характеристики поля ветра, использованные в расчетах, были получены при обработке данных многолетних наблюдений за вектором скорости ветра [12, 13].

Расчеты проводились в области площадью 250×700 км² и высотой 5 км над поверхностью оз. Байкал. Шаги по времени и горизонтали составляли соответственно 150 с и 5 км; шаг по вертикали задавался следующим образом: до высоты 300 м он равнялся 50 м, далее – 200, 1000, 1500 и 2000 м. Коэффициенты турбулентной диффузии рассчитывались с использованием соотношений полуэмпирической теории турбулентности [6]. Предполагалось, что выбрасываемые источниками примеси равномерно распределены в одной пространственной ячейке сеточной области. Начальная концентрация молекулярного азота [N₂] принималась равной 0,93 кг/м³, молекулярного кислорода [O₂] – 0,297 кг/м³, [H₂O₂] – 10^{-9} кг/м³, молекулярного водорода [H₂] – 10^{-7} кг/м³. Начальная концентрация водяного пара [H₂O] варьировалась от 2,23·10⁻⁶ до 2,23·10⁻² кг/м³, т.е. масса H₂O составляла от 1,7·10⁻⁴ до 1,7% массы воздуха. Молекулярный кислород и водяной пар участвовали только в процессе трансформации примесей.

В табл. 1 приведены рассчитанные значения концентраций соединений серы, азота и малых газовых составляющих атмосферы в приводном слое оз. Байкал при начальной концентрации $[H_2O] = 2,23 \cdot 10^{-4}$ кг/м³.Во второй и последующих колонках эти значения даны на профиле, проходящем через ст. Дулиха (подножье хр. Хамар-Дабан) и ориентированном с юго-запада на северовосток, на различных расстояниях от этой станции (расстояния указаны в километрах). Сравнение результатов расчетов концентраций сульфатов и нитратов и данных инструментальных измерений [4] показало их качественное и количественное соответствие. Концентрации других малых составляющих атмосферы по порядку величины соответствуют наблюдаемым в других регионах [14-26]. Из данных табл. 1 следует, что южная котловина озера загрязняется значительно сильнее, чем средняя, значения концентраций в южной (колонки 2, 3 и 4) превышают соответствующие значения в средней котловине (колонки 5, 6 и 7) на порядок и более.

На рис. 1–4 представлены рассчитанные значения плотности массового расхода серной, азотной, азотистой и пероксоазотной кислот в регионе оз. Байкал. Наибольшее воздействие этих соединений отмечено в долине р. Ангара (выбросы Иркутска и Шелехова), над Южным Байкалом, между п. Листвянка и ст. Выдрино – в результате выбросов предприятий Приангарья, Слюдянки и Байкальска, в районе выбросов Селенгинска и Каменска, на севере Байкала (выбросы Северобайкальска и Нижнеангарска). Отметим, что максимум в южной части озера смещен относительно расположения источников выбросов.

Murra a muant		Расстояние от ст. Дулиха, км								
ингредиент	20	70	120	160	200	320	375	435		
1	2	3	4	5	6	7	8	9		
SO ₂	9	0,08	0,01	0,5	0,2	0,008	2.10-6	0,0005		
H_2SO_4	1	0,1	0,02	0,2	0,3	0,01	3.10-6	0,002		
$HSO_3, \cdot 10^{11}$	2	0,05	0,005	0,3	0,2	0,004	9·10 ⁻⁷	0,0003		
$SO_3, \cdot 10^9$	5	0,2	0,02	0,9	0,6	0,01	3-10-6	0,001		
$SO_2^*, \cdot 10^{11}$	4	0,046	0,005	0,2	0,1	0,004	10-6	0,0002		
SO, $\cdot 10^{17}$	4	0,0003	5.10-6	0,01	0,003	3.10-6	$2 \cdot 10^{-13}$	10^{-8}		
$NO_2, \cdot 10^2$	4	0,03	0,003	0,2	0,2	0,005	6·10 ⁻⁷	0,0003		
$HNO_3, \cdot 10$	2	0,1	0,02	0,3	0,6	0,03	10-5	0,002		
$HNO_4, \cdot 10^7$	2	0,08	0,009	0,4	0,7	0,03	10-6	0,01		
NO	2	0,02	0,003	0,2	0,1	0,003	10-6	4.10-5		
$NO_3, \cdot 10^7$	1	0,3	0,05	0,7	2	0,07	2.10-5	0,006		
HNO ₂ , • 10	2	0,07	0,01	0,6	0,5	0,01	$2 \cdot 10^{-6}$	0,0001		
$N_2O_5, \cdot 10^{11}$	9	0,01	0,0003	0,2	0,6	0,0008	2.10-11	3-10-6		
$OH, \cdot 10^3$	0,6	2	2	2	3	2	1	2		
$HO_2, \cdot 10^3$	0,6	3	3	2	4	5	2	31		
$O(^{1}D), \cdot 10^{13}$	1	0,05	0,01	0,2	0,2	0,01	0,0001	0,002		
O ₃	5	0,2	0,04	0,7	0,9	0,06	0,0005	0,009		
$O(^{3}P), \cdot 10^{8}$	2	0,08	0,02	0,3	0,4	0,02	0,0002	0,004		
$H, \cdot 10^{18}$	2	0,04	0,005	0,3	0,6	0,02	$4 \cdot 10^{-5}$	0,02		
$H_2O_2, \cdot 10$	4	1	1	3	4	2	0,6	15		

Рассчитанные значения концентраций, мкг/м³, соединений серы, азота и малых газовых составляющих атмосферы в приводном слое оз. Байкал





Для исследования влияния влажности воздуха были проведены численные эксперименты с различными значениями начальной концентрации водяного пара. Результаты расчетов приведены в табл. 2.

Расчеты показали, что зависимость массы выпадающих кислот от влажности существенная: при увеличении содержания водяного пара в атмосфере с 0,017 до 1,7% массы воздуха масса серной, азотной и азотистой кислот, выпадающая на озеро, увеличивается в 2 раза.



Рис. 2. Изолинии рассчитанной плотности массового расхода НNO₃ у подстилающей поверхности региона оз. Байкал, кг/(км²·год)

Таблица 2

Рассчитанные массы основных неорганических кислот, выпадающие на оз. Байкал за год, кг

Начальная концентрация	Масса, кг					
[H ₂ O], кг/м ³	H_2SO_4	HNO ₃	HNO ₂	HNO_4		
2,23.10-6	7680	1120	1030	0,017		
2,23.10-4	7780	1140	1050	0,017		
2,23.10-2	14080	2360	2160	0,022		



Рис. 3. Изолинии рассчитанной плотности массового расхода HNO₂ у подстилающей поверхности региона оз. Байкал, кг/(км²-год)

Отметим, что величина осаждения зависит также от присутствия других составляющих атмосферы. При увеличении начальной концентрации H_2O_2 на два порядка (с 10^{-10} до 10^{-8} кг/м³) масса серной, азотной и азотистой кислот, осаждающаяся на Байкал за год, увеличивается в 7 (с 2,5 до 18 т), в 40 (с 0,2 до 6,6 т) и в 4 раза (с 0,4 до 1,5 т) соответственно. При изменении начальной концентрации атомарного кислорода $O(^{3}P)$ также на два порядка (с 10^{-14} до 10^{-12} кг/м³) масса серной кислоты увеличивается с 0,3 до 1,6 т, азотной – с 0,02 до 0,5 т, азотистой – с 0,05 до 0,2 т. Таким образом, начальное распределение концентраций малых составляющих атмосферы существенно влияет на загрязнение озера.

Полученные результаты могут быть использованы при оценке вклада массы кислот, выпадающих с осадками, в общую массу кислот, попадающих в озеро Байкал при сухом и влажном осаждении.

- Семенов М.Ю., Нецветаева О.Г., Кобелева Н.А., Ходжер Т.В. Современная и допустимая кислотные нагрузки на территорию азиатской части России // Оптика атмосф. и океана. 2001. Т. 14. № 6–7. С. 499–504.
- Нецветаева О.Г., Ходжер Т.В., Оболкин В.А., Кобелева Н.А., Голобокова Л.П., Коровякова И.В., Чубаров М.П. Химический состав и кислотность атмосферных осадков в Прибайкалье // Оптика атмосф. и океана. 2000. Т. 13. № 6–7. С. 618– 621.
- Аргучинцев В.К., Макухин В.Л. Математическое моделирование распространения аэрозолей и газовых примесей в пограничном слое атмосферы // Оптика атмосф. и океана. 1996. Т. 9. № 6. С. 804–814.
- Аргучинцев В.К., Макухин В.Л., Оболкин В.А., Потемкин В.Л., Ходжер Т.В. Исследование распределения соединений серы и азота в приводном слое оз. Байкал // Оптика атмосф. и океана. 1996. Т. 9. № 6. С. 748–754.

Рис. 4. Изолинии рассчитанной плотности массового расхода НNO₄ у подстилающей поверхности региона оз. Байкал, мг/(км²·год)

- Аргучинцев В.К., Куценогий К.П., Макухин В.Л., Оболкин В.А., Потемкин В.Л., Ходжер Т.В. Экспериментальное исследование и численное моделирование аэрозолей и газовых примесей в атмосфере Южного Байкала // Оптика атмосф. и океана. 1997. Т. 10. № 6. С. 598–604.
- Аргучинцев В.К., Макухин В.Л. Моделирование вертикального распределения концентраций соединений серы и азота в пограничном слое атмосферы Южного Прибайкалья // Оптика атмосф. и океана. 1998. Т. 11. № 6. С. 594–597.
- Государственный доклад. О состоянии окружающей природной среды Иркутской области в 1999 году / Гл. ред. А.Л. Малевский. Иркутск: Гос. комитет по охране окр. среды Ирк. обл., 2000. 320 с.
- Охрана атмосферного воздуха: Статистический бюллетень. Иркутск: Облкомстат, 2000. 165 с.
- Охрана атмосферного воздуха за 1997 год (в разрезе городов и районов): Статистический бюллетень. Иркутск: Гос. комитет РФ по статистике, 1998. 161 с.
- Проблемы охраны озера Байкал и природопользование в Байкальском регионе. М.: Гидрометеоиздат, 1994. 99 с.
- 11. Мониторинг состояния озера Байкал. Л.: Гидрометеоиздат, 1991. 262 с.
- Метеорологические ежемесячники. Вып. 22. Ч. 2. Новосибирск: Гос. комитет СССР по гидромет. и контролю природной среды, 1985–1994. 9096 с.
- Метеорологические ежемесячники. Вып. 23. Ч. 2. Чита: Гос. комитет СССР по гидромет. и контролю природной среды, 1985–1994. 9062 с.
- 14. Кароль И.Л., Розанов В.В., Тимофеев Ю.М. Газовые примеси в атмосфере. Л.: Гидрометеоиздат, 1983. 192 с.
- 15. Брасье Г., Соломон С. Аэрономия средней атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1987. 414 с.
- Марчук Г.И., Кондратьев К.Я. Приоритеты глобальной экологии. М.: Наука, 1992. 264 с.
- Dimitroulopoulos C. and Marsh A.R.W. Modelling studies of NO₃ nighttime chemistry and its effects on subsequent ozone formation // Atmos. Environ. 1997. V. 31. № 18. P. 3041–3057.

- Бримблкумб П. Состав и химия атмосферы / Пер. с англ. М.: Мир, 1988. 352 с.
- 19. Химия окружающей среды / Под ред. Дж.О.М. Бокриса. М.: Химия, 1982. 672 с.
- 20. Кароль И.Л., Затевахин М.А., Ожигина Н.А., Озолин Ю.Э., Рамаросон Р., Розанов Е.В., Станкова Е.Н. Численная модель динамических, микрофизических и фотохимических процессов в конвективном облаке // Изв. РАН. Физ. атмосф. и океана. 2000. Т. 36. № 6. С. 778–793.
- Гершензон Ю.М., Звенигородский С.Г., Розенитейн В.Б. Химия радикалов ОН, НО₂ в земной атмосфере // Успехи химии. 1990. Т. 59. Вып. 10. С. 1601–1626.
- 22. Захаров В.М., Костко О.К., Хмелевцов С.С. Лидары и исследование климата. Л.: Гидрометеоиздат, 1990. 320 с.

- Thompson A.M. Measuring and Modeling the Tropospheric Hydroxyl Radical (OH) // J. Atmos. Sci. 1995. V. 52. № 19. P. 3315–3327.
- 24. Armerding W., Spickermann M., Walter J. and Gomes F.J. MOAS: An Absorption Laser Spectrometer for Sensitive and Loae Monitoring of Tropospheric OH and Other Trace Gases // J. Atmos. Sci. 1995. V. 52. № 19. P. 3381–3392.
- Imasu R., Suda A. and Matsuno T. Radiative Effects and Halocarbon Global Warming Potentials of Replacement Compounds for Clorofluorocarbons // J. Meteorol. Soc. Jap. 1995. V. 73. № 6. P. 1123–1136.
- Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985. 256 с.

V.K. Arguchintsev, V.L. Makukhin. Numerical simulation of spread, transformation, and deposition of S, N, and C compounds in the Baikal region.

An assessment of the amount of acids annually deposited from the atmosphere to the Lake Baikal surface and nearby areas as carried out by numerical solution of the semi-empirical equation of impurity turbulence diffusion.