

ПРИМЕНЕНИЕ КАЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА В АТМОСФЕРНОЙ ФОТОХИМИИ

Гордов Е.П., Родимова О.Б., Фазлиев А.З.

*Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск, Россия
Gordov@cnod.iao.tomsk.ru*

Увеличение антропогенного влияния на химический состав атмосферы и обнаруженные сезонные вариации озонного слоя сделали актуальной задачу прогноза поведения этой сложной фотохимической системы. В рамках стандартных подходов эта задача сводится к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений для концентраций присутствующих в атмосфере реагентов. В достаточно реалистичных моделях учитывается более 150 реагентов, что, однако, позволяет прогнозировать эволюцию системы лишь для заданных начальных условий и на конечных временах.

Предлагаемый нами подход состоит из типичного для физики построения простых моделей, описывающихся малоразмерными системами уравнений и их исследовании методами нелинейной динамики, см., например, [1-6]. В частности, прогноз поведения дается фазовым портретом, получаемым с помощью качественного анализа соответствующей системы уравнений. Этот подход применяется к эволюции озона в атмосфере Земли

Количество соединений, включаемых в циклы химических реакций, которые могут приводить к истощению озонного слоя, измеряется десятками и имеет тенденцию к дальнейшему росту. В значительной степени из-за этого обстоятельства относительная роль различных реакций и соединений в возможном уменьшении общего количества озона выясняется, как правило, путем численного решения систем уравнений химической кинетики. При этом какие-либо нетривиальные черты поведения химической системы могут остаться необнаруженными из-за того, что условия, при которых они осуществляются, далеки от традиционно рассматриваемых в исследуемой задаче. В этой ситуации оказывается полезным анализ имеющихся систем уравнений методами нелинейной динамики, дающий полное число стационарных состояний системы, их характер и изменение этой картины при изменении параметров задачи.

Ряд работ посвящен анализу множественности стационарных состояний в конкретных фотохимических системах, описывающих атмосферные процессы. Они интересны как сами по себе, открывая нетривиальные черты поведения в рассматриваемых системах, так и с общей точки зрения, свидетельствуя, что атмосфера как химическая система в высокой степени нелинейна, и ее поведение может быть описано только адекватными этому факту методами. Однако, имеющиеся исследования атмосферной фотохимии методами нелинейной динамики не дают еще возможности ответить на вопрос, возникающий как реакция на обнаружение т.н. озонных дыр, а именно, является ли их появление естественным процессом в атмосфере планеты, либо вызвано антропогенными химическими воздействиями. Более того, даже простейший озонный цикл, сформулированный Чепменом, не исследован полностью с точки зрения нелинейного анализа. Так, остается неясным, присущи ли черты нелинейного поведения озонному циклу, то есть известному набору реакций в чисто кислородной атмосфере, как таковому, либо они привносятся в проблему дополнительными химическими соединениями. Исследование чисто кислородной атмосферы с помощью методов нелинейной динамики представляет интерес как с точки зрения атмосферной химии, предоставляя полное понимание качественных закономерностей поведения базисной фотохимической модели, так и с точки зрения поведения элементарных систем в химических реакторах.

В данной работе проведен полный качественный анализ системы уравнений озонного цикла в кислородной атмосфере. Для всех рассмотренных ситуаций получены все возможные стационарные состояния и проанализирован их характер устойчивости. Проведен анализ изменений фазовых портретов при изменении полного числа кислородных частиц A ($A=[O]+2[O_2]+3[O_3]$). Для некоторых наборов реакций обнаружено наличие двух стационарных состояний в треугольнике реакций и исчезновение одного из них при изменении параметра A . Предложены варианты экспериментального обнаружения возможных бифуркаций в химическом реакторе.

В случае чисто кислородной атмосферы объектом изучения является система кинетических уравнений для трех кислородных составляющих. Расширение списка реагирующих веществ приводит к существенному росту числа уравнений и, соответственно, к необходимости анализа многомерных фазовых портретов, что почти с необходимостью ведет к потере наглядности, столь привлекательной при рассмотрении систем с малым числом измерений. В частности, для кислородно-водородной атмосферы, реализующейся в мезосфере, число переменных равно восьми. Для описания фотохимии мезосферы мы выбрали в качестве малоразмерной модели упрощенную систему реакций, предложенную в [7] для описания процессов в стратосфере и содержащую помимо чисто кислородных реакций некую суммарную реакцию водорода с озоном. Справедливость применяемых приближений устанавливается сравнением полученных результатов со следующими из системы без приближений. Получив согласие при таком сравнении, на основе полного качественного анализа можно осуществлять прогноз качественных изменений для малоразмерной модели с тем, чтобы вести их целенаправленный поиск в модели, более близкой к реальности. Подчеркнем, что нас интересуют сейчас именно качественные изменения, то есть появление или исчезновение стационарных состояний, изменение характера их устойчивости, а также тенденции долговременной эволюции концентраций.

Проведен качественный анализ такой упрощенной системы реакций и поведение концентраций O и O_3 сравнено с их поведением в модели [8], более сложной и более близкой к реальности. Тенденции изменений совпадают в обеих моделях. Тем самым показано, что качественные особенности малоразмерных моделей могут сохраняться в реальных моделях, и обоснована возможность построения базовой модели для кислородно-водородной атмосферы.

Литература

1. Гордов Е.П., Родимова О.Б., Смирнов Ю.Е., Оптика атмосферы 1988. Т.1. С.56-63.
2. Гордов Е.П., Родимова О.Б., Сенников В.А. Оптика атмосферы и океана 1993. Т.6. С. 452-457, 1994. Т.7. С. 909-913.
3. Гордов Е.П., Родимова О.Б., Сенников В.А., Фазлиев А.З. Оптика атмосферы и океана 1994. Т.7. 1288-1296.
4. Гордов Е.П., Фазлиев А.З. Оптика атмосферы и океана 1995. Т.8. С.1383-1393.
5. Гордов Е.П., Родимова О.Б., Творогов С.Д., Фазлиев А.З. Оптика атмосферы и океана 1996. Т.9. С. 1272-1286.
6. Е.П.Гордов, В.С.Карпов, Н.А.Лаврентьев, О.Б.Родимова, А.З.Фазлиев, Оптика Атмосферы и Океана 1997. Т. 10. №9.
7. Сывороткин В.Л., Садовский Н.А. ДАН 1992. Т.323. С. 731- 733.
8. Yang P.and Brasseur G. J.Geophys.Res. 1994. V.99. P.20955 - 20965.