Э к о л о г и я

УДК 575:636.082.22:639.3

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЛОБАЛЬНОГО ПЕРЕНОСА СТОЙКИХ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ[1]

Г. И. Марчук[2], ***А. Е. Алоян***[3], ***В. О. Арутюнян***[4]

NUMERICAL MODELING OF GLOBAL TRANSPORT OF RESISTANT ORGANIC POLLUTANTS IN THE ENVIRONMENT

Marchuk G. I., Aloyan A. E., Arutyunyan V. O.

A numerical model of the global transport of resistant organic pollutants in the Northern hemisphere is considered by the example of lindane. The model includes a series of physical mechanisms responsible for the environmental evolution of these substances with consideration to their degradation in different media (atmosphere, water, soil). The model makes it possible to investigate spatial and temporal variations of resistant organic pollutants in the Northern hemisphere resulting from European-source emissions, and to calculate their monthly-mean percentile content and accumulation in different media, as well as the rate of their degradation. The numerical experiments were performed for a period of one year (1992), using the European Center for Medium Range Weather Forecasts (ECMWF) meteorological data.

Введение

Огромное количество антропогенных загрязняющих веществ, выбрасываемых в атмосферу, а также вносимых в почву минеральных удобрений и ядохимикатов, включаются в биогеохимические циклы и заметным образом меняют их. Важным звеном глобальных биогеохимических циклов являются процессы трансформации органических веществ. Антропогенные воздействия приводят к нарушению циклов практически всех химических элементов. Выбрасываемые в атмосферу газовые примеси претерпевают ряд физико-химических превращений, что приводит к их деградации в окружающей природной среде. Среди газовых примесей особое место занимают стойкие органические вещества (СОВ), характерной особенностью которых является их способность к переносу в газовой фазе, их деградация в результате различных физико-химических механизмов и гидрофобность (слабая растворимость в воде), что существенно сказывается на адсорбционных процессах в почве, атмосферном аэрозоле и др. СОВ имеют антропогенное происхождение (продукты химической промышленности, сгорания топлива, транспорта, сельского хозяйства и пр.) и могут накапливаться и держаться в атмосфере достаточно долгое время. Эти вещества обладают способностью переноситься на дальние расстояния благодаря свойствам низкой летучести, высокой устойчивости и биоаккумуляции. Их изучению придается большое внимание [1,2]. В настоящее время систематизированных данных о поступлении СОВ в окружающую среду довольно мало. Можно указать на линдан (гамма-изомер гек-

[1]Работа выполнена при поддержке РФФИ (03-05-64484) и р2003юг (03-01-96519, 03-01-96587, 03-01-96546), а также проекта МНТЦ 1908.

[2]Марчук Гурий Иванович, академик РАН, д-р физ.-мат. наук, Институт вычислительной математики РАН, советник Президиума РАН.

[3]Алоян Арташ Еремович, д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Института вычислительной математики РАН.

[4]Арутюнян Вардан Оганесович, канд. физ.-мат.наук, научный сотрудник Института вычислительной математики РАН.

сахлорциклотексана, γ-ГХЦГ), данные о котором позволяют с достаточно хорошей точностью утверждать, что это вещество поступает в атмосферу в газовом состоянии (как пар) и подвержено процессам сухого и влажного осаждения, а также деградации. В настоящей статье приведены результаты численного моделирования переноса СОВ (на примере линдана) в северном полушарии с учетом взаимодействия с земной и водной поверхностями и источников выбросов, расположенных на территориях европейских стран.

1. Постановка задачи

Модель рассматривается применительно к сферической Земле в системе координат (λ, ψ, z), где λ — долгота, ψ — дополнение до широты, z — высота от подстилающей поверхности.

Основное уравнение переноса СОВ в северном полушарии запишем в виде

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\frac{u}{a\sin\psi}\frac{\partial\varphi}{\partial\lambda}+\frac{v}{a}\frac{\partial\varphi}{\partial\psi}+w\frac{\partial\varphi}{\partial z}= \\ =F-P_1\varphi-P_2\varphi+\frac{\partial}{\partial z}\nu\frac{\partial\varphi}{\partial z}+\frac{1}{a^2\sin^2\psi}\frac{\partial}{\partial\lambda}\mu\frac{\partial\varphi}{\partial\lambda}+ \\ +\frac{1}{a^2\sin\psi}\frac{\partial}{\partial\psi}\mu\sin\psi\frac{\partial\varphi}{\partial\psi}. \quad (1.1)$$

Здесь $\varphi=\varphi(\lambda,\psi,z,t)$ — концентрация примеси; (u,v,w) — компоненты вектора скорости ветра в направлении λ, ψ, z, соответственно; μ, ν — коэффициенты турбулентного обмена в горизонтальном и вертикальном направлениях соответственно; F — функция размещения и мощности источников выбросов; P_1 описывает величину осаждения примеси из атмосферы; P_2 — деградацию примеси в атмосфере; a — средний радиус Земли.

Уравнение (1.1) рассматривается в области $D_t=G\times[(0,T])$, где $G=S\times[0,H])$; $S=\{(\lambda,\psi):\ 0\le\lambda\le 2\pi,\ 0\le\psi\le\pi/2\}$, H — верхняя граница расчетной области.

Сформулируем краевое условие задачи (1.1) на уровне высоты приземного слоя атмосферы $z=\delta(\lambda,\psi)+h$

$$\varphi(0,\psi,z,t)=\varphi(2\pi,\psi,z,t),$$
$$\varphi(\lambda,-\psi,z,t)=\varphi(\lambda+\pi,\psi,z,t),$$
$$\varphi(\lambda,\pi+\psi,z,t)=\varphi(\lambda+\pi,\pi-\psi,z,t),$$
$$\frac{\partial\varphi}{\partial\psi}=0 \text{ при } \psi=\pi/2.$$

На верхней границе атмосферы при $z=H$ рассмотрим следующее краевое условие:

$$\nu\frac{\partial\varphi}{\partial z}=0 \quad \text{при} \quad z=H.$$

Начальное условие выберем в виде

$$\varphi=\bar\varphi \quad \text{при} \quad t=0,$$

где $\bar\varphi=\bar\varphi(\lambda,\ \psi,\ z)$ — «фоновая» концентрация примеси.

Поскольку в глобальных атмосферных моделях пространственное разрешение по вертикали оказывается недостаточным для восстановления полей с нужной точностью в нижних слоях атмосферы, метеорологические характеристики пограничного слоя можно рассчитывать с помощью параметризаций планетарного пограничного слоя атмосферы, изложенных в [3, 4].

Для глобального переноса особый интерес представляют примеси с малыми скоростями гравитационного оседания, которые значительное время находятся во взвешенном состоянии и переносятся вместе с воздушными массами. В этом случае для примесей применимы подходы теории турбулентности, используемые в моделях общей циркуляции для описания турбулентного обмена температуры и влажности. В частности, для определения коэффициента горизонтального турбулентного обмена используется следующая модель:

$$\mu=k_1^2\Delta S\,|D_N|\,,$$

где

$$D_N=\left(D_T^2+D_S^2\right)^{1/2},$$

$$D_T=\frac{1}{a\sin\psi}\frac{\partial u}{\partial\lambda}-\frac{\partial v}{2\partial\psi},$$

$$D_S=\frac{1}{a\sin\psi}\frac{\partial v}{\partial\lambda}+\frac{\partial u}{2\partial\psi},$$

ΔS — площадь элементарной ячейки сеточной области, k_1 — безразмерный параметр.

Потоки газовых примесей и аэрозолей в приземном слое атмосферы. Для задания краевого условия на высоте приземного слоя атмосферы $z=h$ используется уравнение,

описывающее сопротивление примесям поверхности земли как совокупность следующих трех членов: аэродинамическое сопротивление r_a, квази-ламинарное сопротивление пограничного слоя r_b, обусловленное процессами молекулярной диффузии вблизи поверхности земли, и поверхностное сопротивление r_c, связанное с процессами на поверхности осаждения. Выражение для r_c будет дано ниже.

Итак, потоки примесей в приземном слое атмосферы представим в виде

$$\nu \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{1}{r_a + r_b + r_c} \left(\varphi - \varphi_{\text{surf}}\right),$$

где

$$r_b = \frac{2}{æ u_*} \left(\frac{S_c}{Pr}\right)^{2/3},$$

$S_c = 1,5 \times 10^{-5}$ — число Шмидта, $Pr = 0,71$ — число Прандтля.

Для задания граничных условий при $z = h$ используется теория Монина-Обухова [5] и эмпирические функции Бузингера [6], конкретный вид которых приведен в [7].

Аэродинамическое сопротивление вычисляется по формуле

$$r_a = \frac{1}{c_u c_\vartheta \left|\mathbf{u}\right|},$$

где c_u и c_ϑ определяются из модели приземного слоя.

Коэффициент поверхностного сопротивления r_c над сушей определяется из модели, описывающей перенос примесей в почве с одновременным использованием потоков на границе раздела атмосфера-почва [8]. Формулы для r_c над сушей и поверхностью воды таковы:

$$r_c = \frac{1}{R_g \left(\frac{2D_E}{\Delta z_1} + pV_E\right)} \quad \text{над сушей;}$$

$$r_c = K_H r_w \quad \text{над морем.}$$

Сопротивление растительного покрова r_c вычисляется как

$$\frac{1}{r_c} = \frac{1}{r_{st} + r_{ms}} + \frac{1}{r_{sl}} + \frac{1}{r_{ct}},$$

где r_{st}, r_{ms}, r_{ct} и r_{sl} — устьичное, мезофильное, кутикулярное и почвенное сопротивления соответственно.

Устьичное сопротивление является функцией фотосинтетически активной радиации, температуры воздуха, водного потенциала листа и дефицита давления пара. Сопротивление захвату газов мезофильными ячейками определяется площадью мезофиля и растворимостью газов ($\approx$ 0,1–0,5 см/сек). Кутикулярное сопротивление связывается с захватом газа на поверхности листа, оно зависит от химических характеристик исследуемых газов и определяется площадью листовой поверхности и воском ($\leqslant$ 200 см/сек).

Опишем основные физические принципы трансформации СОВ в разных средах. Использованная здесь методика базируется, в основном, на работах [8, 9].

Скорость разложения в почве. Периоды полуисчезновения линдана из почвы, определенные в полевых экспериментах, при поверхностном внесении варьируют в пределах 150–350 дней. Однако в полевых условиях в период после внесения основным механизмом выведения линдана из почвы является его испарение в атмосферу. Поэтому константа скорости разложения для этого пестицида может быть определена только в лабораторных экспериментах, где испарение либо подавлено, либо поддается точному учету.

В диапазоне температур от 15 до 35°C и влажности от 20 до 75 % полевой влагоемкости w константа скорости разложения k_b может быть расчитана с помощью следующих уравнений [10]:

$k_b(\text{сут}^{-1}) = -(176 + 9,6t + 4,7w_l) \times 10^{-5}$ для чернозема;

$k_b(\text{сут}^{-1}) = -(1185 + 40,8t + 15,9w_l) \times 10^{-5}$ для серозема;

$k_b(\text{сут}^{-1}) = -(620 + 31,9t + 6,5w_l) \times 10^{-5}$ для темно-каштановой почвы.

Здесь t — температура в $\circ C$; w_l — влажность в % от полевой влагоемкости.

Скорость разложения в воде. Константа скорости щелочного гидролиза

$$k(\text{мин}^{-1}) = a_{oh} k_b,$$

$$\log k_b\left(\frac{\text{л}}{\text{моль} \cdot \text{мин}}\right) = (-8850/T + 30,46)/2,3.$$

При pH=7 и $t = 25°C$ период полуразложения в результате гидролиза составляет 6 лет. Периоды полуразложения в воде по реакции с гидроксил-радикалом в пресных водах, морских прибрежных водах и в открытом океане составляют 1,3, 27 и 530 дней соответственно.

Деградация а атмосфере. Поскольку основной целью является изучение долгосрочной изменчивости СОВ в атмосфере, то химические и биологические механизмы этого процесса здесь не учитываются. Трансформации СОВ в атмосфере описываются с помощью эффективного коэффициента деградации k_d в кинетическом уравнении

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -k_d \varphi.$$

Рассматривается простая форма k_d, хотя для детерминистического описания деградации должны быть учтены более сложные взаимоотношения.

2. Обмен между почвой и атмосферой

В почве СОВ существуют в основном в трех состояниях: вода φ_L (в растворенном виде), газ φ_g и адсорбированное состояние φ_s. Кристаллическое состояние не учитывается.

Концентрацию СОВ можно представить в виде

$$\varphi_T = \rho_S \varphi_S + \vartheta \varphi_L + (\Phi - \vartheta)\varphi_g, \qquad (2.1)$$

где ρ_S — объемная плотность, Φ — пористость почвы, ϑ — объемная влажность.

Концентрации φ_S, φ_L и φ_g относятся к взаимосвязанным величинам соответственно массы раствора почвы, скелета и пространства свободного пара. Используя закон Генри, можно получить соотношения для φ_g и φ_s

$$\varphi_g = K_H \varphi_L, \qquad (2.2)$$

$$\varphi_S = k_d \varphi_L \qquad (2.3)$$

(K_H — безразмерный коэффициент Генри; k_d — наклон изотермы адсорбции).

Используя (2.1)–(2.3), находим

$$\varphi_T = R_L \varphi_L = R_S \varphi_S = R_g \varphi_g,$$

где коэффициенты различных состояний СОВ описываются формулами

$$R_L = \rho_S k_d + \vartheta + (\Phi - \vartheta) K_H,$$

$$R_S = \rho_S + \frac{\vartheta}{k_d} + \frac{(\Phi - \vartheta) K_H}{k_d},$$

$$R_g = \frac{\rho_S k_d}{K_H} + \frac{\vartheta}{K_H} + (\Phi - \vartheta).$$

Коэффициент Генри определяется следующим образом:

$$K_H = K_{H0} e^{b_1 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T0}\right)},$$

где $K_{H0} = K_H(T0)$; b_1 — эмпирическая константа.

Адсорбция СОВ в почве зависит от свойств почвы, в частности, от содержания в ней органики. Для ее учета вводится в рассмотрение коэффициент распределения углерода K_{oc}:

$$k_d = f_{oc} K_{oc},$$

где f_{oc} — доля органики в почве.

Для проведения численных экспериментов необходимы данные о содержании органики в северном полушарии, которые имеются в глобальной базе данных о 27 типах почв Земного шара с разрешением $1^\circ \times 1^\circ$, а также в карте содержания органики в Европе.

3. Миграция СОВ в почве

Как известно, перенос СОВ в почве обусловлен молекулярными процессами с временем перемешивания более длительным, чем в атмосфере. Предполагая стационарность и однородность по глубине характеристик почв, газовый поток СОВ можно представить в виде

$$I_g = -\xi_g(a) D_g \frac{\partial \varphi_g}{\partial z}, \qquad (3.1)$$

Здесь $a = \Phi - \vartheta$, D_g — коэффициент двойной диффузии на высоте z, $\xi_g(a) = a^{1/3}/\Phi^2$.

Подобным образом поток в водной фазе I_{Ld} можно записать как

$$I_{Ld} = -\xi_L(\theta) D_L \frac{\partial \varphi_L}{\partial z}. \qquad (3.2)$$

Используя (3.1), (3.2) и эффективный коэффициент диффузии, поток СОВ представим в форме

$$I_g + I_{Ld} = -\left(\frac{\xi_g D_g}{R_g} + \frac{\xi_L D_L}{R_L}\right) \frac{\partial \varphi_T}{\partial z} = -D_E \frac{\partial \varphi_T}{\partial z}, \qquad (3.3)$$

D_E — эффективный коэффициент диффузии для системы газ-вода.

Конвективный поток описывается выражением

$$I_w \varphi_L = V_E \varphi_T, \qquad (3.4)$$

где $V_E = I_w / R_L$ — скорость растворения.

Теперь полный поток I_T в почве будет

$$I_T = V_E\varphi_T - D_E\frac{\partial\varphi_T}{\partial z}. \qquad (3.5)$$

Используя (3.1)–(3.5), уравнение для миграции СОВ в почве запишем в виде

$$\frac{\partial\varphi_T}{\partial t} = -\frac{\partial I_T}{\partial z} + S_s(z). \qquad (3.6)$$

Функция $S_s(z)$ в (3.6) описывает источники и стоки на уровне z, учитывающие деградацию в почве.

Поток СОВ на границе раздела атмосфера-почва дается формулой

$$I_{T,S} = D_E\frac{\varphi_T - \varphi_L}{0.5\Delta z_L} + +V_E(p\varphi_T + q\varphi_L),$$

где $\Delta z_L = 0{,}0005$ м; p и q — весовые коэффициенты ($p + q = 1$), позволяющие сохранять нужный уровень концентрации в верхнем слое почвы.

4. Газофазный обмен между атмосферой и морем

Предполагается, что состояние равновесия между концентрациями СОВ в атмосфере φ_{zoc} и море φ_w сохраняется на их разделе. Согласно закону Генри

$$\varphi_{zoc} = K_H\varphi_w.$$

Потоки в приземном слое атмосферы и интегральном слое воды считаются постоянными

$$F_w = F_{g,a}.$$

Здесь F_w — поток СОВ в воде, который можно представить в виде

$$F_w = D_L\frac{\varphi_{w,k} - \varphi_w}{\Delta z_{wm}} = \frac{\varphi_{w,k} - \varphi_w}{r_w},$$

где $\Delta z_{wm} = 0{,}00004$ м; r_w — сопротивление контрпереноса в молекулярном слое.

Как и в случае для почвы, уравнение для описания изменчивости СОВ имеет форму

$$\frac{\partial\varphi_w}{\partial t} = -\frac{\partial I_T}{\partial z} + S_w(z),$$

где $S_w(z)$ описывает деградацию в воде. При этом предполагается, что $S_w(z)$=0.

Формулы для поверхностного сопротивления r_c над сушей и поверхностью воды таковы:

$$r_c = \frac{1}{R_g\left(\frac{2D_E}{\Delta z_1} + pV_E\right)} \quad \text{над сушей;}$$

$$r_c = K_H r_w \quad \text{над морем.}$$

5. Влажное осаждение

Удаление линдана из атмосферы осадками характеризуется отношением вымывания W_{sc}. Молекулы газа, войдя в каплю, растворяются так быстро, что этот процесс можно считать мгновенным, учитывая пространственно-временные масштабы изучаемой задачи. Поскольку константа Генри K_H обратно пропорциональна отношению вымывания ($K_H = 1/W_{sc}$), то равновесное разделение на газофазную $\varphi_{a,g}$ и жидкофазную $\varphi_{a,w}$ составляющие концентрации линдана имеет вид

$$\varphi_{a,g} = K_H\varphi_{a,w}.$$

Изменчивость концентрации вещества во времени можно представить в виде

$$\frac{\partial\varphi_{a,g}}{\partial t} = \frac{R_i W_{sc}(\varphi_{a,g} - \varphi_u)}{\Delta z_a}, \qquad (5.1)$$

где R_i — интенсивность дождя; φ_u — концентрация на уровне, расположенном непосредственно выше рассматриваемого слоя, которая принимается константой за один шаг по времени. При этих предположениях уравнение (5.1) решается аналитически

$$\varphi_{a,g} = \varphi_u\left(1 - e^{-\alpha t}\right) + \varphi^0_{a,g}e^{-\alpha t},$$

где $\alpha = RW_{sc}/\Delta z_a$; $\varphi^0_{a,g}$ — концентрация при $t = t_0$. Поэтому поток влажного осаждения имеет вид

$$F_i = R_i\varphi_{a,w}.$$

6. Результаты численных экспериментов

Численные алгоритмы решения задачи изложены в работах [4, 11–14].

С использованием описанной выше модели проведены численные эксперименты по определению характеристик переноса и трансформации выброшенного в атмосферу линдана из европейских источников в северном полушарии за период январь – декабрь 1992 г. В численных расчетах были использованы следующие входные параметры [8]: шаги в почве $\Delta z_1 = 0{,}5$ см,

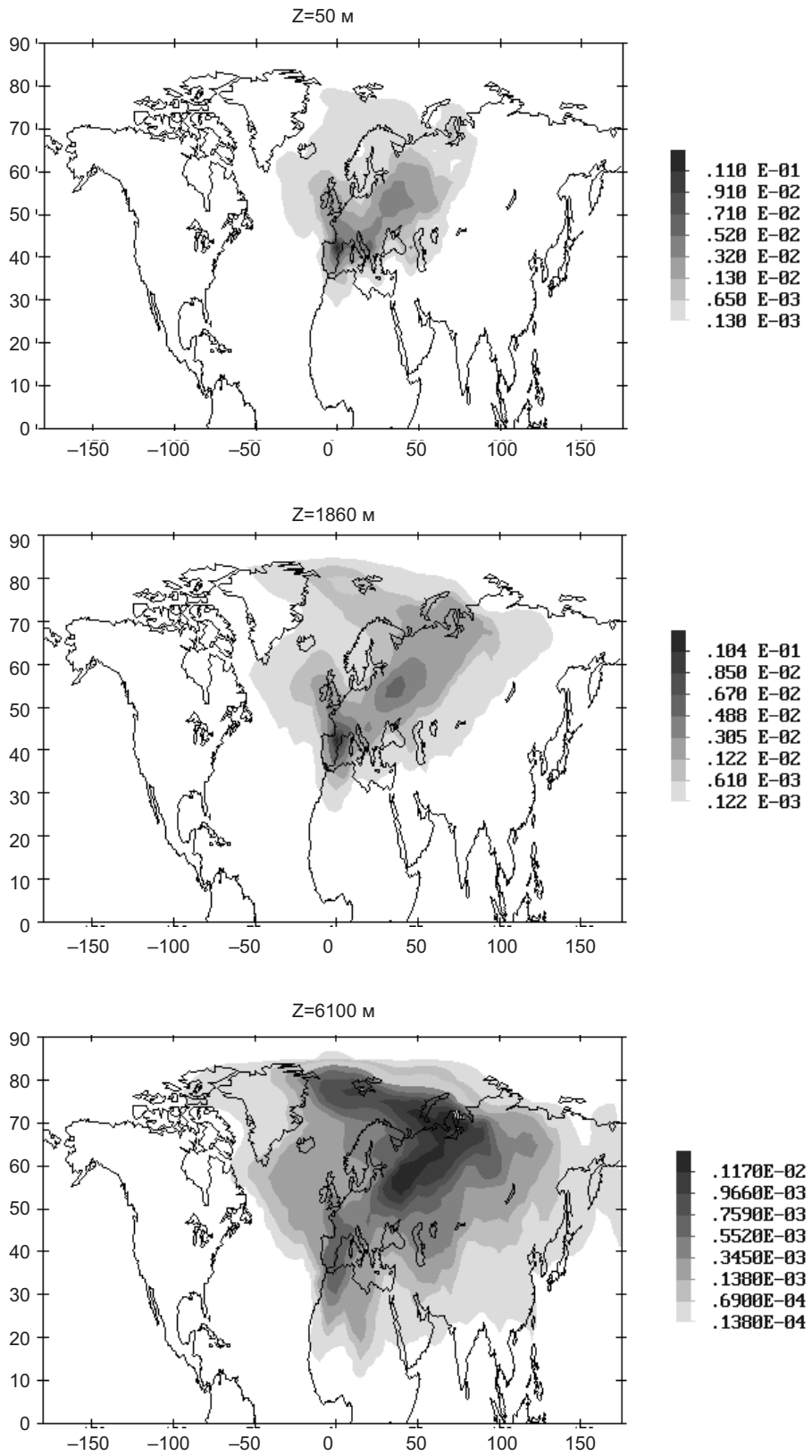
Z=50 м
.110 E-01
.910 E-02
.710 E-02
.520 E-02
.320 E-02
.130 E-02
.650 E-03
.130 E-03
Z=1860 м
.104 E-01
.850 E-02
.670 E-02
.488 E-02
.305 E-02
.122 E-02
.610 E-03
.122 E-03
Z=6100 м
.1170E-02
.9660E-03
.7590E-03
.5520E-03
.3450E-03
.1380E-03
.6900E-04
.1380E-04
90
80
70
60
50
40
30
20
10
0
–150
–100
–50
0
50
100
150

Рис. 1

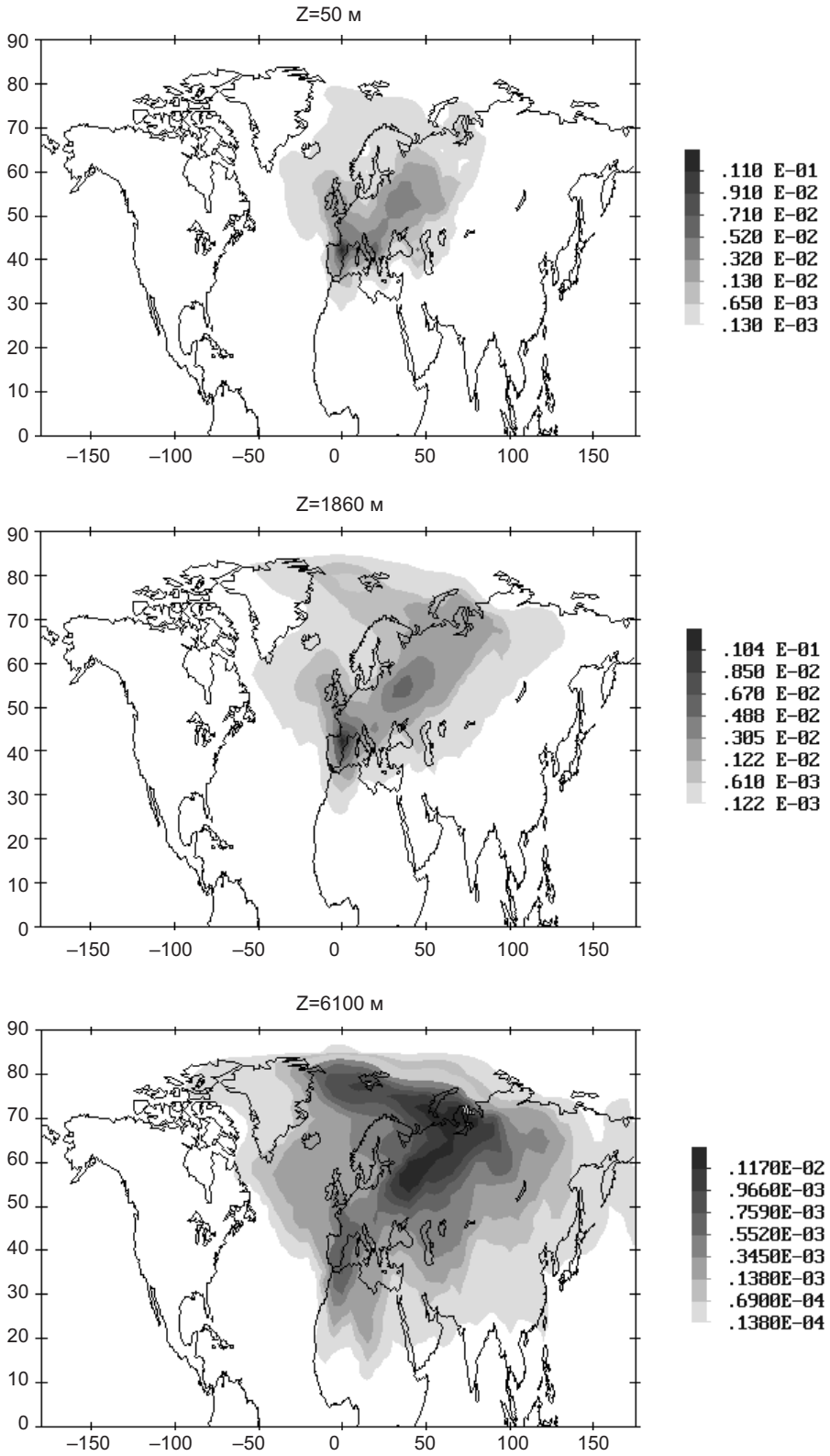
Z=50 м
.110 E-01
.910 E-02
.710 E-02
.520 E-02
.320 E-02
.130 E-02
.650 E-03
.130 E-03
Z=1860 м
.104 E-01
.850 E-02
.670 E-02
.488 E-02
.305 E-02
.122 E-02
.610 E-03
.122 E-03
Z=6100 м
.1170E-02
.9660E-03
.7590E-03
.5520E-03
.3450E-03
.1380E-03
.6900E-04
.1380E-04
90
80
70
60
50
40
30
20
10
0
–150
–100
–50
0
50
100
150

Рис. 2

$\Delta z_2 = 0{,}5$ см, $\Delta z_3 = 1{,}0$ см, $\Delta z_4 = 2{,}0$ см, $\Delta z_5 = 11{,}0$ см; толщина слоя для интегральных потоков в воде $\Delta z_w = 25$ м; эффективные коэффициенты деградации $k_d = 2,5 \cdot 10^{-7}$ с$^{-1}$ (в атмосфере), $k_s = 3{,}0 \cdot 10^{-8}$ с$^{-1}$ (в почве), $k_w = 0$ (в воде); коэффициент Генри $K_{HO} = 0{,}073$ Па$\cdot$м$^{-3}$ моль$^{-1}$; $T_0 = 283{,}15$ К; коэффициент температурной зависимости $b_1 = -7329$ К; коэффициент разделения органического углерода $K_{oc} = 1,3$ м$^3\cdot$кг$^{-1}$; средняя объемная влажность почвы $\theta = 0{,}3$; пористость $\Phi = 0{,}5$; коэффициенты молекулярной диффузии $D_g = 5 \cdot 10^{-6}$ м$^2\cdot$с$^{-1}$ (в атмосфере) и $D_L = 5 \cdot 10^{-10}$ м$^2\cdot$с$^{-1}$ (в воде). Параметры вычислительной сетки: 144×73 по долготе и широте с шагом 2,5°×1,25°; вертикальные уровни на высотах 110, 380, 650, 920, 1 190, 1 460, 1 860, 2 460, 3 200, 4 100, 6 100, 7 100, 8 100 и 9 160 м; шаг по времени 30 мин.

Метеорологическая информация взята из базы данных Европейского центра по среднесрочным прогнозам (ECMWF), а данные по выбросам линдана из европейских источников — согласно проекту ESQUAD. Общее количесво выбросов в 2 690 т/год были распределены по месяцам следующим образом: январь — 0%, февраль — 10%, март — 15%, апрель, май, июнь — 25%; июль-декабрь — 0% (т.е. предполагается, что в последующих месяцах выбросов не было).

На рис. 1–2 показаны изолинии концентрации линдана для февраля и июня месяцев на высотах 50, 1 860 и 6 100 м, соответственно. Единица измерений концентрации — μ г$\cdot$м$^{-3}$. Результаты численных расчетов показывают, что в период с февраля по июнь линдан может переноситься достаточно далеко по горизонтали, а также по вертикали до верхней тропосферы, благодаря турбулентному перемешиванию и конвективным процессам. Максимальные концентрации в этот перод локализованы в атмосферном пограничном слое европейского региона. Когда выбросы отсутствуют (июль – декабрь), линдан уже успевает распространяться почти по всему северному полушарию, а его концентрация в тропосфере оказывается даже выше, чем в атмосферном пограничном слое. Это связано с тем, что из-за влажного осаждения линдан частично вымывается из нижней тропосферы, в то время как в средней тропосфере его концентрация подвержена небольшим изменениям из-за активного турбулентного перемешивания и отсутствия осадков. В верхних слоях атмосферы главной составляющей переноса является адвекция. Начиная с октября, концентрация линдана в нижних слоях атмосферы увеличивается из-за реэмиссии из почвы, хотя и снижается по высоте. По мере того как эти реэмиссии становятся значительными, максимальные концентрации достигаются в ограниченных по размеру областях.

На рис. 3 показаны результаты расчетов среднемесячных концентраций линдана на высоте $z = 50$ м (рис. 3а), суммарного газового потока (рис. 3б) и влажного осаждения на сушу и водную поверхность области EMEP (рис. 3в). Среднемесячные концентрации линдана существенно различаются на суше и море: в первом случае максимум достигается в июне (0,004 μг$\cdot$м$^{-3}$), а во втором — в марте (0,001 μг$\cdot$м$^{-3}$). Начиная с июля, концентрации линдана становятся незначительными. Как и следовало ожидать, влажное осаждение увеличивается между февралем и июнем, что обусловлено возрастающими уровнями концентрации линдана. В последующие месяцы, когда эмиссии от наземных источников отсутствуют, но осадки есть, влажное осаждение сильно снижается и достигает своего минимального значения. Это объясняется тем, что в этот период количество линдана в атмосфере мало. Иначе обстоит дело с сухим осаждением, которое в основном подвержено влиянию механизмов турбулентности в пограничном слое. В июле газовый поток меняет знак (концентрация линдана в почве больше, чем а атмосфере). Благодаря реэмиссии, поток постепенно увеличивается, имея все еще отрицательные значения. При отсутствии выбросов, когда реэмиссия максимальна в июле – августе, ее вклад в концентрацию линдана в атмосфере незначителен. Это можно объяснить тем, что содержание линдана в атмосфере выше, чем значения реэмиссии от почвы. В дальнейшем, когда содержание линдана в атмосфере снижается, роль реэмиссии соответственно возрастает. Результаты численных экспериментов показали, что линдан в средней атмосфере трансформируется меньше, чем в пограничном слое; в нижнем слое толщиной 2 км его содержание снижается благодаря влажной конвекции и отсутствию выбросов при все еще низких уровнях реэмиссий.

На рис. 4 приведены интегральные характеристики распределения линдана в ОПС и дано их процентное содержание в разных средах (атмосфера, почва, море, деградация в

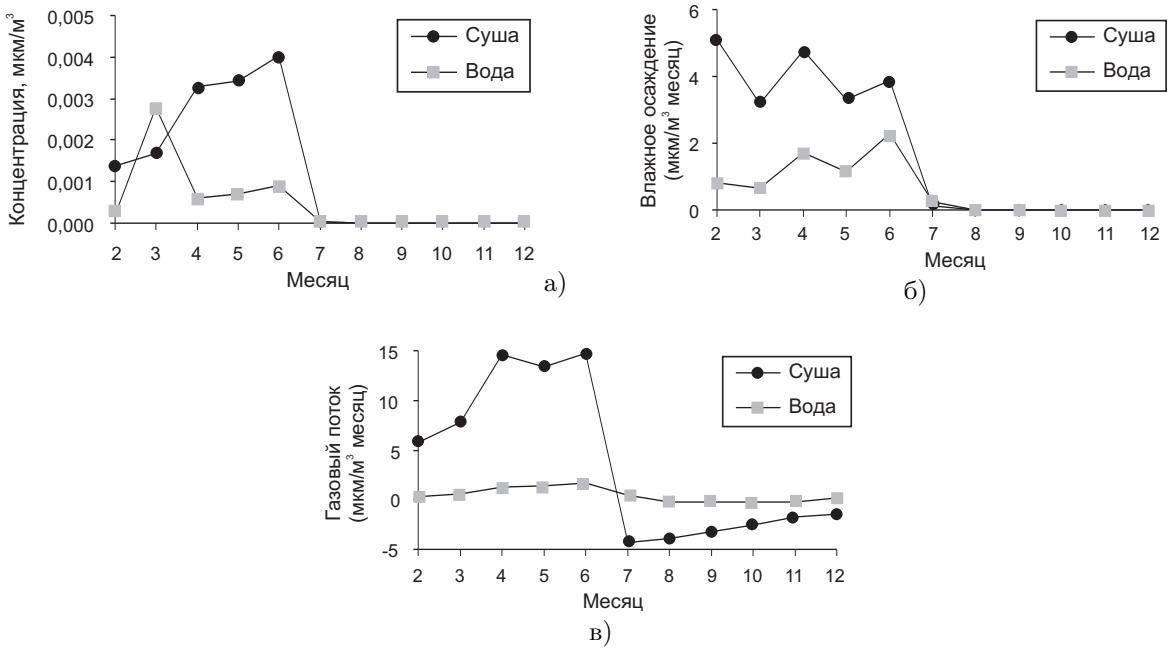
Концентрация, мкм/м^3
0,005
0,004
0,003
0,002
0,001
0,000
2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12
Месяц
Суша
Вода
а)
Влажное осаждение (мкм/м^3 месяц)
6
4
2
0
2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12
Месяц
Суша
Вода
б)
Газовый поток (мкм/м^3 месяц)
15
10
5
0
-5
2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12
Месяц
Суша
Вода
в)

Рис. 3

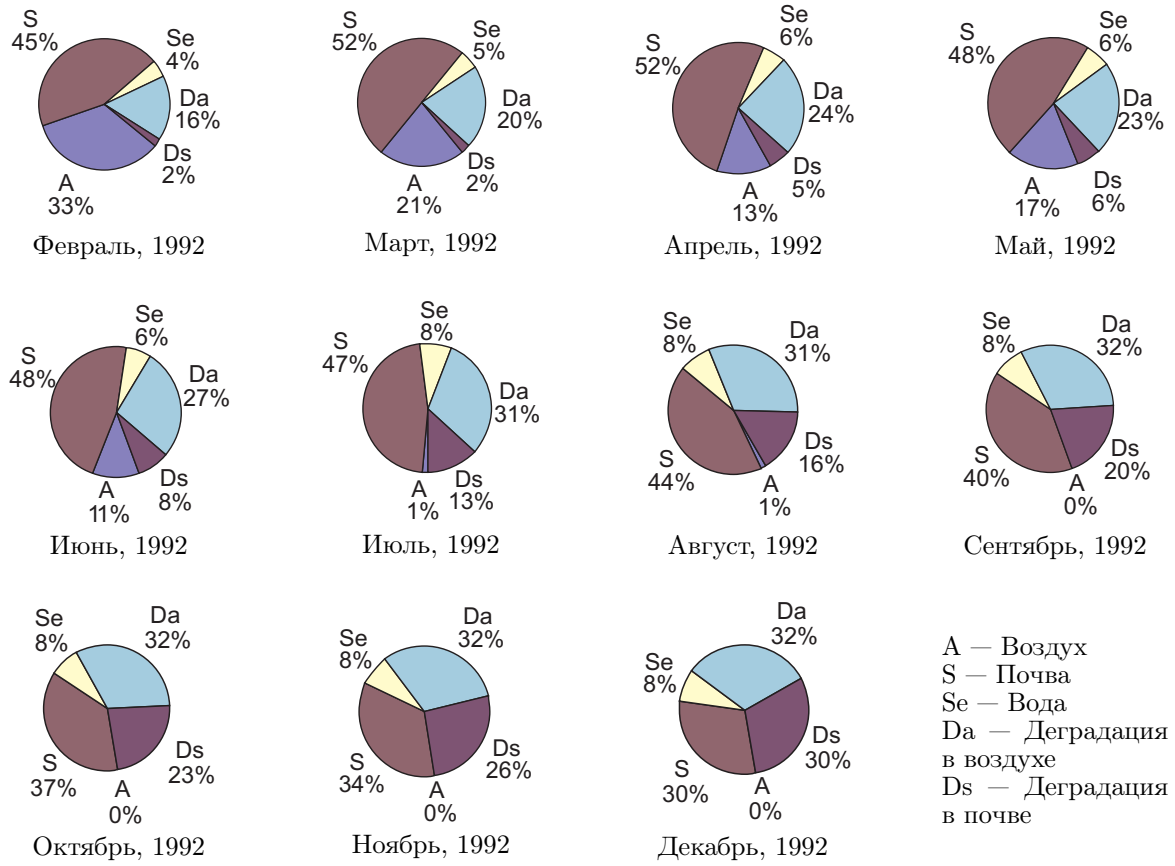
S 45% Se 4% Da 16% Ds 2% A 33%
Февраль, 1992
S 52% Se 5% Da 20% Ds 2% A 21%
Март, 1992
Se 6% S 52% Da 24% Ds 5% A 13%
Апрель, 1992
S 48% Se 6% Da 23% Ds 6% A 17%
Май, 1992
Se 6% S 48% Da 27% Ds 8% A 11%
Июнь, 1992
Se 8% S 47% Da 31% Ds 13% A 1%
Июль, 1992
Se 8% Da 31% Ds 16% S 44% A 1%
Август, 1992
Se 8% Da 32% Ds 20% S 40% A 0%
Сентябрь, 1992
Se 8% Da 32% Ds 23% S 37% A 0%
Октябрь, 1992
Se 8% Da 32% Ds 26% S 34% A 0%
Ноябрь, 1992
Da 32% Se 8% Ds 30% S 30% A 0%
Декабрь, 1992
A — Воздух
S — Почва
Se — Вода
Da — Деградация в воздухе
Ds — Деградация в почве

Рис. 4

почве и атмосфере) для каждого месяца 1992 года. Согласно численным расчетам, время жизни линдана в атмосфере составило $\sim$ 382 дней, а в атмосфере и в почве совместно — 197 дней.

Заключение

Поскольку время жизни СОВ в окружающей среде значительное, важно правильно оценить их накопление и деградацию в различных средах: в атмосфере, почве и воде. Глобальный перенос и деградация СОВ в окружающей среде существенно зависят от характера атмосферной циркуляции, теплофизических характеристик почвы, а также ряда физико-химических процессов, протекающих в почве. Распределение СОВ в окружающей среде имеет ярко выраженный сезонный ход, и механизмы накопления отличаются на разных континентах, что обусловлено сухим и влажным осаждением (осадками), а также содержанием в почве органических веществ, ответственных за их деградацию. Разработанная численная модель может быть эффективно использована также для описании эволюции других загрязнителей из семейства СОВ в окружающей среде с учетом их специфики и физико-химических параметров.

Литература

1. UN-ECE. State of knowledge report of UN ECE Task force on Persistent Organic Pollutants for the Convention on Long-Range Transboundary Air Pollution, 1994.
2. UNEP Survey on Sources of POPs. Report prepared for an IFCS Expert Meeting on Persistent Organic Pollutants. Manila, the Philippines, 17–19 June 1996.
3. *Yordanov D. L.,Penenko V. V., Aloyan A. E.* О вертикальной скорости ППС над орографически и термально неоднородной поверхностью // Изв. АН СССР. Сер. Физика атмосферы и океана. 1979. Т. 15. є 11. С. 1204–1208.
4. *Марчук Г. И., Алоян А. Е.* Глобальный перенос примеси в атмосфере // Изв. АН СССР. Сер. Физика атмосферы и океана. 1995. Т. 31. є 5. С. 597–606.
5. *Монин А. С., Яглом А. М.* Статистическая гидромеханика. Ч. 1. М.: Наука, 1965. 640 с.
6. *Businger J. A., Wyngard J. C., Izumi Y., Bradley E. F.* Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer // J. Atmos. Sci. 1971. 28. No 2. P. 181–189.
7. *Penenko V. V., Aloyan A.A.* Models and Methods for Environmental Protection Problems. Novosibirsk. Nauka, 1985. 256 p. (in Russian).
8. *Jacobs C. M., Van Pul W. A. J.* Long-range atmospheric transport of persistent organic pollutants, I: Description of surface-atmosphere exchange modules and implementation in EUROS. RIVM, Report 722401013, 1996.
9. *Jury W. A., Spencer W. F., Farmer W. J.* Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soil: Model Description // J. Env. Qual. 1983. 12. P. 558–564.
10. *Цукерман В. Г.* Моделирование поведения изомеров ГХЦГ и симазина в различных типах почв Казахской ССР // Миграция загрязняющих веществ в почвах и сопредельных средах: Тр. 4 Всесоюзного совещания. Обнинск, 1983. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. С. 31–35.
11. *Aloyan A. E., Arutyunyan V. O.* Numerical Modeling of Lindane Transport in the Northern Hemisphere. MSC-E Report, 1998.
12. *Aloyan A. E.* Numerical modeling of the interaction of gas species and aerosols in the atmospheric dispersive systems // Russ. J. Num. Anal. Math. Modell. 2000. V. 15, No 3-4. P. 211–224.
13. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980. 535 с.
14. *Алоян А. Е.* Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: ИВМ РАН, 2002. 201 с.

Статья поступила 21 марта 2005 г.
Институт вычислительной математики РАН
© Марчук Г. И., Алоян А. Е., Арутюнян В. О., 2005