

УДК 504.3.054

В.П. БЕСПАЛОВ*, О.В. ХАЛЧЕНКОВ*, І.В. КОВАЛЕЦЬ*

ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ СУХОГО ТА ВОЛОГОГО ОСАДЖЕННЯ ХІМІЧНИХ РЕЧОВИН У СИСТЕМІ «ПОВІТРЯ»

*Інститут проблем математичних машин і систем НАН України, м. Київ, Україна

Анотація. Раніше розроблена система «Повітря» дозволяє проводити розрахунок атмосферного розповсюдження 36-ти хімічних речовин шляхом використання моделі атмосферного перенесення CALPUFF. Після огляду літературних джерел у даній роботі встановлено значення параметрів для розрахунку сухого і вологого осадження забруднюючих речовин у системі «Повітря» згідно з вимогами моделі CALPUFF. На підставі аналізу параметризації моделі визначено параметри, які залежать від виду речовини. Для забруднюючих речовин, які розповсюджуються у формі аерозолів, тільки один параметр – коефіцієнт вимивання, який входить у формулу розрахунку вологого осадження, залежить від виду речовини. Інші параметри осадження для аерозолів є функцією характеристик розподілу частинок за розмірами, тому не розглядаються в даній роботі. Коефіцієнт вимивання встановлено для всіх видів хімічних речовин – аерозолів та газів, які моделюються системою «Повітря» в залежності від розчинності речовини (для газів) або змішуваності (для аерозолів). Для газів від виду речовини також залежать декілька інших параметрів у формулах розрахунку осадження, а саме: коефіцієнт молекулярної дифузії, коефіцієнт збільшення розчинності, реактивність, опір мезофілу та константа Генрі. Для 17-ти видів газоподібних забруднюючих речовин у роботі встановлені значення відповідних параметрів. Для визначення константи Генрі встановлені відповідності між визначеннями даного параметра у використаних літературних джерелах та в моделі CALPUFF. Для опору мезофілу запропоновано інтерполяційну формулу для розрахунку цього параметра як функції розчинності. Найменше даних знайдено для реактивності та коефіцієнта збільшення розчинності. Тому, за окремими винятками, значення відповідних параметрів задані однаковими для усіх речовин. Більш детальне визначення даних параметрів потребує окремого дослідження.

Ключові слова: атмосферні забруднення, осадження, коефіцієнт вимивання, опір мезофілу, CALPUFF.

Abstract. The previously developed system Povitrya allows the calculation of the atmospheric distribution of 36 chemicals using the CALPUFF atmospheric dispersion model. In this paper, after the literature review and according to the requirements of the CALPUFF model, the values of the parameters for the calculation of dry and wet depositions of pollutants in the Povitrya system have been defined. Based on the analysis of the model parameters, the parameters that depend on the type of substance have been identified. For pollutants that spread in the form of aerosols, only one parameter – the scavenging coefficient included in the formula for the calculation of wet deposition – depends on the type of substance. Other deposition parameters for aerosols are a function of the characteristics of the particle size distribution, so they are not considered in this paper. The scavenging coefficient is specified for all types of chemicals – aerosols and gases modeled by the Povitrya system depending on the solubility of the substance (for gases) or miscibility (for aerosols). For gases, several other parameters in deposition calculation formulas also depend on the type of substance, namely: molecular diffusivity, solubility enhancement factor, reactivity, mesophyll resistance, and Henry's law. The values of the corresponding parameters are set for 17 types of gaseous pollutants. To determine Henry's law constant, there have been established correspondences between the definitions of this parameter in the literature and the CALPUFF model. For mesophyll resistance, an interpolation formula is proposed to calculate this parameter as a function of solubility. The least data was found for reactivity and solubility enhancement coefficient. Therefore, with some exceptions, the values of the relevant parameters are set the same for all substances. A more detailed definition of these parameters requires a separate study.

1. Вступ

У попередніх роботах [1, 2] розроблено та надано у відкритий доступ систему «Повітря» для розрахунку атмосферного розповсюдження забруднень після викидів в атмосферу внаслідок техногенних аварій. Окрім розрахунку концентрацій забруднюючих речовин (ЗР) у повітрі, для ряду випадків важливо розраховувати осадження хімічних речовин на поверхню Землі та на рослинність. За наявністю таких даних можна, зокрема, оцінити ризики, пов'язані зі вторинним забрудненням атмосфери, забрудненням продуктів харчування, та збитки, спричинені сільськогосподарському виробництву [3]. Однак, вологе і сухе осадження різних речовин відбувається з різною інтенсивністю, яка залежить не тільки від метеорологічних умов, але й від фізико-хімічних властивостей речовин. У роботі [4] описані параметри, які використовуються в системі «Повітря» для розрахунку осадження аерозолів і газів. Причому для усіх газоподібних ЗР використовується однаковий набір параметрів. Аналогічно, для усіх видів аерозолів – також однаковий набір параметрів. З огляду на те, що система дає змогу розраховувати розповсюдження 36-ти ЗР, такий підхід є вочевидь надто спрощеним. Оскільки у системі «Повітря» для розрахунку атмосферного розповсюдження використовується модель CALPUFF [5], то для кожної з речовин мають бути визначені параметри, які відповідають параметризації сухого та вологого осадження цієї моделі. Однак, у самій моделі CALPUFF надаються відповідні значення параметрів тільки для декількох найбільш відомих ЗР, таких як NO_2 та SO_2 .

Метою даної роботи є встановлення значень параметрів для розрахунку сухого і вологого осадження ЗР у системі «Повітря» згідно з параметризацією моделі CALPUFF на підставі огляду літературних джерел.

2. Огляд параметризації сухого та вологого осадження в моделі CALPUFF

Процеси сухого та вологого осадження параметризовані в CALPUFF [5] на підставі методу «опорів» [6]. Найбільш важливі фактори, що впливають на швидкість сухого осадження, включають властивості осаджуваного матеріалу (наприклад, розмір частинок, форму і щільність; коефіцієнт дифузії газу, розчинність і реакційну здатність), характеристики поверхні (наприклад, шорсткість поверхні, тип рослинності, її щільність і фізіологічний стан) та атмосферні змінні (наприклад, категорія стійкості, інтенсивність турбулентних пульсацій) [7]. Викладемо основні параметризації сухого та вологого осадження для газів та аерозолів згідно з реалізованими у моделі CALPUFF [5].

Атмосферний шар, в якому відбувається осадження, поділяється на такі підшари: поверхневий, квазіламінарний та шар рослинності (рис. 1). Поверхневий шар, де можна вважати турбулентний потік постійним по висоті, простягається від кількох метрів над рівнем поверхні Землі до приблизно 100–200 м над поверхнею. Основним механізмом осадження у даному шарі є турбулентний потік. У квазіламінарному шарі процеси осадження здійснюються шляхом молекулярної дифузії. У шарі рослинності осадження газів здійснюється під фізико-хімічним впливом рослинності. Частинки додатково осаджуються під дією гравітаційної сили. Без урахування впливу гравітаційного осадження потік речовини F [кг/м²с] між шарами осадження пов'язаний із концентрацією C_b [кг/м³] у верхній частині атмосферного шару за формулою

$$F = v_d C_b, \quad (1)$$

$$v_d = \frac{1}{\sum_i r_i},$$

де v_d [м/с] – загальна швидкість осадження, яка обраховується після підсумку опорів r_i усіх шарів.

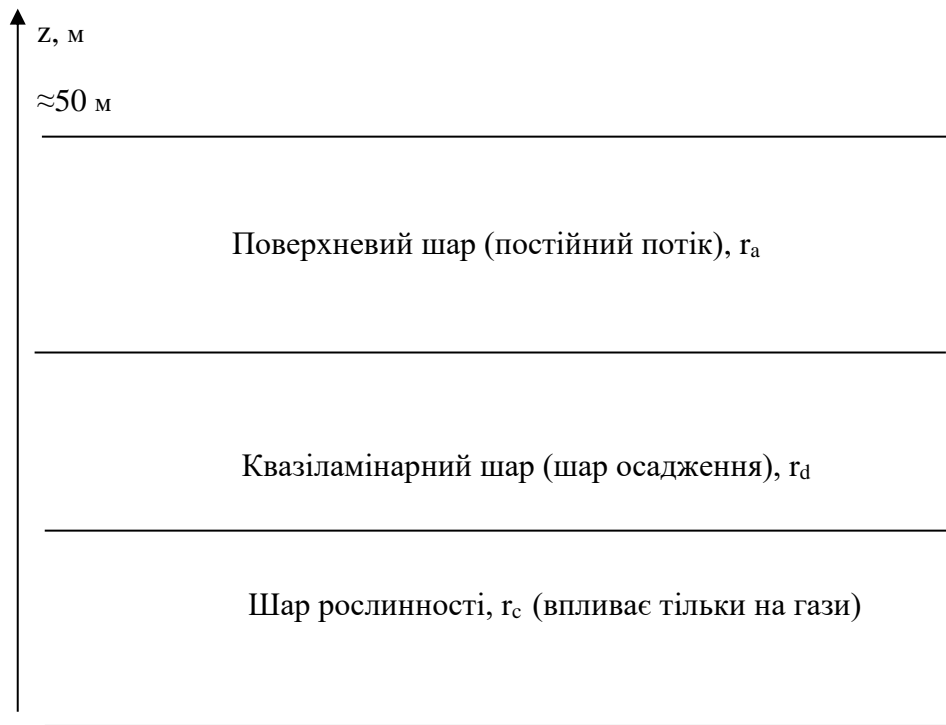


Рисунок 1 – Шари моделі, для яких параметризовані опори: поверхневий, квазіламінарний (шар осадження) та шар рослинності

Швидкість осадження для газів отримується із співвідношення

$$v_{d,gas} = \frac{1}{r_a + r_d + r_c}. \quad (2)$$

Для частинок формула (2) модифікована з урахуванням швидкості гравітаційного осадження, що приводить до такої формули:

$$v_{d,part} = \frac{1}{r_a + r_d + r_d r_d v_g} + v_g. \quad (3)$$

Швидкість гравітаційного осадження визначається за допомогою відомої, але дещо модифікованої у CALPUFF формули Стокса:

$$v_g = C \frac{d_p^2 g (\rho_p - \rho_a)}{18\nu}, \quad (4)$$

де d_p [м] – діаметр частинки, ρ_p – щільність частинки, ρ_a – щільність повітря, ν [м²/с] – в'язкість повітря, C – безрозмірний поправочний коефіцієнт Каннінгема для дрібних частинок.

Оскільки, згідно з формулами (3)–(4), швидкість осадження частинок залежить від їх розмірів, у той час як насправді частинки мають різні розміри, CALPUFF обчислює ефективну швидкість осадження для заданого розподілу частинок за розмірами. Розподіл частинок за розмірами представлений у CALPUFF двома параметрами: середнім геометричним діаметром GMD та геометричним стандартним відхиленням розподілу GSD.

Опір поверхневого шару r_a розраховується згідно з теорією логарифмічного приземного шару [6]:

$$r_a = \frac{1}{0.4u_*} \left[\ln \left(\frac{z_s}{z_0} \right) - \varphi_H \right], \quad (5)$$

де u_* – швидкість тертя, z_s – висота поверхневого шару, z_0 – довжина шорсткості, яка залежить від категорії землекористування, φ_H – універсальна функція, яка враховує стійкість атмосфери. Таким чином, опір поверхневого шару залежить тільки від метеорологічних параметрів та параметрів землекористування і не залежить від фізико-хімічних властивостей частинок чи газів.

Опір шару осадження r_d в CALPUFF визначається по-різному для газів та частинок [5]. Однак в обох випадках він залежить від числа Шмідта $Sc = \nu/D$, яке є відношенням молекулярної в'язкості повітря до коефіцієнта молекулярної дифузії. Що стосується газів, коефіцієнт молекулярної дифузії D залежить від хімічної речовини.

Для транспортування через квазіламінарний шар осадження опір шару для газоподібних забруднювачів параметризовано за формулою

$$r_d = \frac{d_1 Sc^{d_2}}{k u_*}, \quad (6)$$

де Sc – число Шмідта, ν – кінематична в'язкість повітря [$0,15 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$], D – коефіцієнт молекулярної дифузії забруднюючої речовини [$\text{м}^2/\text{с}$], d_1, d_2 – емпіричні параметри, $k = 0,4$ – безрозмірна постійна Кармана [6].

Коефіцієнт дифузії D частинок аерозолію залежить лише від їх розмірів та розраховується у CALPUFF на підставі зазначених параметрів розподілу GMD, GSD, які таким чином впливають на значення опору r_d .

Опір квазіламінарного шару осадження для частинок параметризовано за формулою

$$r_d = (Sc^{-2/3} + 10^{-3/St})^{-1} u_*^{-1}. \quad (7)$$

Тут число Стокса $St = (v_g / g)(u_*^2 / \nu)$, а g – прискорення вільного падіння. Число St є мірою ймовірності зіткнення частинок і збільшується зі збільшенням розміру частинок.

Опір рослинного шару r_c впливає тільки на осадження газів. Він описує вплив наступних процесів на сухе осадження газів у шарі рослинності:

1. Перенесення через устьїчні отвори та розчинення або реакція у клітинах мезофілу представлена внутрішнім опором листків r_f .

2. Реакція чи передача через кутикулу листа.

3. Перенесення у ґрунт/водну поверхню.

Ці процесі розглядаються як три окремі опори:

$$r_c = (LAI / r_f + LAI / r_{cut} + 1 / r_g)^{-1}, \quad (8)$$

де r_f – внутрішній опір листя [с/м], r_{cut} – опір кутикули [с/м], r_g – опір поверхні землі або води [с/м], LAI – індекс площі листви, який характеризує відношення площі поверхні листового покриву до площі землі. Індекс LAI параметризується у CALPUFF як функція типу землекористування.

Перший із процесів, як правило, найбільш важливий для поглинання розчинних забруднювачів у шарі рослинності. Внутрішній опір листків складається із двох компонентів:

$$r_f = r_s + r_m, \quad (9)$$

де r_s [с/м] – опір транспорту через устьїчні отвори, r_m [с/м] – опір розчинення або реакції забруднюючої речовини у клітинах мезофілу.

У кінцевому результаті опір рослинного шару залежить від індексу площі листового покриву LAI та наступних параметрів, що залежать від речовини: молярної маси μ [г/моль], коефіцієнта дифузії D [см²/с], коефіцієнта збільшення розчинності (ALPHA_STAR, безрозмірний), реактивності (R , безрозмірна), опору мезофілу (r_m [с/см]), константи Генрі (H , безрозмірна).

При вологому осадженні газоподібні забруднювачі видаляються шляхом розчинення у хмарних краплях та опадах. Тверді забруднювачі речовини видаляються за рахунок вимивання краплями води. На відстані від джерела до рецептора від десятків до сотень кілометрів вологе осадження може привести до значного зменшення ЗР у повітрі [5]. Вологе осадження параметризується в CALPUFF стандартним чином через рівняння зменшення маси викиду M_p у частинці речовини («пуфі»):

$$\frac{dM_p}{dt} = -\Lambda, \quad (10)$$

де Λ [1/с] є коефіцієнтом очищення, який встановлюється пропорційним інтенсивності опадів:

$$\Lambda = \lambda_w \frac{R}{R_1}. \quad (11)$$

Тут λ_w – коефіцієнт вимивання (scavenging coefficient) [1/с], R [мм/год] – інтенсивність опадів, $R_1 = 1 \text{ мм/год}$ – еталонна інтенсивність опадів.

3. Визначення параметрів хімічних речовин для сухого та вологого осадження

Список хімічних речовин, для яких здійснюється розрахунок у системі «Повітря», наведено у табл. 1. Серед списку хімічних речовин є фіктивна речовина – «трасер», тобто речовина, подібна благородним газам, яка не вступає в реакцію і не осаджується. У ряду випадків розрахунок із використанням трасера дає консервативні оцінки концентрацій речовини в атмосферному повітрі.

Таблиця 1 – Список хімічних речовин із зазначенням їх молярних мас та коефіцієнтів вимивання («scavenging coefficient»), які використовуються для розрахунку вологого осадження у CALPUFF

Назва речовини	Назва речовини (англійською)	Хімічна формула	Аерозоль (P) / Газ (G)	μ , Г/МОЛЬ	λ_w , 1/с
Нітрил акрилової кислоти	Nitrile of acrylic acid	C3H3N	P	53,1	0,0001
Нітробензол	Nitrobenzene	C6H5NO2	P	123,1	0,0001
Діоксид азоту	Nitrogen dioxide	NO2	G	46,0	0
Трасер	Tracer	–	–	–	–
Оксид вуглецю	Carbon monoxide	CO	G	28,0	0
Оксид етилену	Ethylene oxide	C2H4O	G	44,1	0,00001
Олеум	Oleum	H2 SO4	P	98,1	0,0001
Сірководень	Hydrogen sulfide	H2S	G	34,1	0
Сірковуглець	Carbon disulphide	CS2	P	76,1	0,0001
Сірчаний ангідрид	Sulfur dioxide	SO2	G	64,1	0,00003
Соляна кислота	Hydrochloric acid	HCL	P	36,5	0,00011
Стирол	Styrene	C8H8	P	104,2	0,0001
Тетраетил свинець	Tetraethyl lead	C8H2	P	323,4	0,0001
Формальдегід	Formaldehyde	CH2 O	G	30,0	0,000014
Фосген	Phosgene	COCL2	G	98,9	0
Фурфурол	Furfural	C5H4O2	P	96,1	0,0001
Хлорпикрин	Chloropicrin	CCL3NO2	P	164,4	0,0001
Хлор	Chlorine	CL2	G	70,9	0,00001
Аміак	Ammonia	NH3	G	17,0	0,00014
Азотна кислота	Nitric acid	HNO3	P	63,0	0,0001
Акрилонітрил	Acrylonitrile	C3H3N	P	53,1	0,0001
Аміл	Amil	N2O4	G	92,0	0,00001
Анілін	Aniline	C6H7N	P	93,6	0,0001
Вініл хлористий	Vinyl chloride	C2H3CL	G	62,5	0
Водень фтористий	Hydrogen fluoride	HF	G	20,0	0,00001
Водень ціаністий	Hydrogen cyanide	HCN	G	27,0	0,00001
Гептил	Heptyl	C2H8N2	P	158,2	0,0001
Гідразин	Hydrazine	N2H4	P	32,0	0,0001
Бутадієн	Butadiene	C4H6	G	54,1	0
Диметиламін	Dimethylamines	C2H7N	G	45,1	0,00001
Дихлоретан	Dichloroethane	C2H4CL2	P	99,0	0,0001
Діоксин	Dioxin	C12H4CL	P	322,0	0,0001
Етил меркаптан	Ethyl mercaptan	C2H6S	P	62,1	0,0001
Метил хлористий	Methyl chloride	CH3CL	G	50,5	0
Метиламін	Methylamine	CH3NH2	G	31,1	0

Крім назв хімічних речовин, у табл. 1 представлені молярні маси та коефіцієнти вимивання λ_w , що використовуються для розрахунку вологого осадження відповідної хімічної речовини. Для аерозолів усі інші параметри, крім λ_w , залежать не від виду речовини, а від зазначених вище параметрів розподілу частинок за розмірами – GMD та GSD.

Коефіцієнти вимивання у табл. 1 було визначено з огляду літератури. Для газів NO₂, CO, SO₂, C₂H₃CL, HF використані значення λ_w , наведені в документації CALPUFF [5], або у файлі specs.lib інформаційної системи CALPUFF PRO [8]. Для аерозолів, які добре змішуються з водою, та легкокорозивних газів (C₂H₄O, N₂O₄, HCN, C₂H₇N) використовується мінімальне значення коефіцієнта вимивання 1E-5, яке є близьким до відповідного значення λ_w для формальдегіду CH₂O, обраного згідно з документацією моделі LOTOS-EUROS [9]. Для хлору CL₂ значення λ_w взяте з роботи [10]. Для газів, які погано розчиняються у воді, встановлено значення $\lambda_w = 0$. Для інших аерозолів використовується значення коефіцієнта вимивання 1E-4 [11]. Для соляної кислоти HCL значення λ_w наведене у роботі [12], тоді як для аміаку NH₃ відповідне значення наведене у роботі [9].

У різних довідкових матеріалах можуть використовуватись різні одиниці вимірів, а іноді навіть різні формули для розрахунку вологого осадження. Тому для отримання значень, представлених у табл. 1, іноді необхідно було здійснити перетворення одиниць вимірів. У роботі [12] використовується параметризація вологого осадження дещо інша, ніж формула (11), але при еталонній інтенсивності опадів 1 мм/год обидві формули стають ідентичними, що дає змогу використати числові коефіцієнти з роботи [12] для визначення λ_w .

Таблиця 2 – Параметри, що стосуються сухого осадження газів: коефіцієнт молекулярної дифузії D, коефіцієнт збільшення розчинності ('solubility enhancement factor' ALPHA_STAR), реактивність ('reactivity' R), опір мезофілу ('mesophyll resistance', r_m), константа Генрі ('Henry's law coefficient', H)

Назва речовини	Хімічна формула	D, см ² /с	ALPHA_STAR	R	r_m (с/см)	H
Діоксид азоту	NO ₂	0,166	1	8	5	3,5
Оксид вуглецю	CO	0,1860	1	2	61	44
Оксид етилену	C ₂ H ₄ O	0,126	1	8	0	0,004
Сірководень	H ₂ S	0,163	1	8	29	0,4
Сірчаний ангідрид	SO ₂	0,1509	1000	8	0	0,04
Формальдегід	CH ₂ O	0,169	1	8	0	0,00001
Фосген	COCL ₂	0,099	1	8	100	0,6
Хлор	CL ₂	0,122	1	8	0	0,01
Аміак	NH ₃	0,262	1	8	0	0,0007
Аміл	N ₂ O ₄	0,128	1	8	0	0,01
Вініл хлористий	C ₂ H ₃ CL	0,1083	1	8	31	0,9
Водень фтористий	HF	0,2199	1	8	0	0,000003
Водень ціаністий	HCN	0,184	1	8	0	0,004
Бутадиєн	C ₄ H ₆	0,1	1	8	41	4
Диметиламін	C ₂ H ₇ N	0,121	1	8	0	0,000015
Метил хлористий	CH ₃ CL	0,127	1	8	29	0,4
Метиламін	CH ₃ NH ₂	0,157	1	8	39	0,003

У табл. 2 представлені додаткові параметри, які стосуються сухого осадження газів. Коефіцієнт молекулярної дифузії визначався за формулою (11) з довідника [13], що застосовується для стандартних умов температури та тиску. Значення коефіцієнта збільшення розчинності ALPHA_STAR для всіх речовин, згаданих у роботах [14] та [8], були рівні 1, крім

SO₂, для якого відповідне значення дорівнює 1000. Тому для усіх речовин, крім SO₂, в цій роботі відповідне значення було встановлено рівним 1.

Значення реактивності за замовчуванням у CALPUFF: $R = 8$. У роботі [8] для більшості речовин встановлене відповідне значення: $R = 8$. Винятком є чадний газ CO, для якого значення реактивності, згідно з роботою [8], $R = 2$. Оскільки знайти відповідні значення для інших речовин у літературі не вдалося, тому для усіх речовин, окрім CO, було встановлено значення $R = 8$.

Відповідно до документації CALPUFF [5], опір мезофілу r_m залежить від розчинності та реакційної здатності забруднювача. Для деяких хімічних речовин (CO, NO₂, SO₂) значення r_m наведене у роботі [5]. Зокрема, для SO₂ у [5] наведене значення $r_m = 0$ (при розчинності діоксиду сірки $S = 94$ г/л). Для CO у [5] наведене значення $r_m = 61$ с/см (при розчинності чадного газу $S = 0,027$ г/л). Оскільки в літературі практично неможливо знайти значення опору мезофілу для інших речовин, у даній роботі r_m параметризовано як функцію розчинності шляхом логарифмічної інтерполяції між двома вищезгаданими значеннями:

$$r_m = -7,48 \ln(S) + 33,983. \quad (12)$$

Для хімічних речовин із розчинністю $S < 0,027$ г/л використовується максимальне значення опору мезофілу $r_m = 100$. Для хімічних речовин, що реагують із водою з утворенням інших речовин, приймається опір нульовий $r_m = 0$ (еквівалент повної розчинності).

Значення розмірних констант Генрі H_2 [моль/м³Па] для різних хімічних речовин зібрані у роботі [15]. Між розмірною константою Генрі H_2 і безрозмірною константою H , яка використовується у CALPUFF, можна встановити таку відповідність:

$$H = \frac{1}{2479H_2}. \quad (13)$$

Формула (13) отримана шляхом використання коефіцієнта переведення з табл. 2 у роботі [16] та встановленої відповідності між безрозмірною константою Генрі k_H^{cc} за визначенням у роботі [16] та константою H , яка використовується у CALPUFF: $H = 1/k_H^{cc}$. Справедливість формули (13) перевірено шляхом порівняння отриманих результатів з «еталонними» значеннями константи Генрі для SO₂, NO₂, CH₄, HNO₃, наведеними в документації CALPUFF [5] та у [8]. Наприклад, для діоксиду сірки SO₂ у [15] приводиться декілька значень H_2 , одне з яких $H_2 = 0,011$. За формулою (13) отримуємо оцінку $H = 0,037$, що близько до відповідного значення $H = 0,04$, яке наведене у [5]. Аналогічно, згідно з [15], для NO₂ $H_2 = 0,00012$. За формулою (13) отримуємо оцінку $H = 3,36$, яка є близькою до відповідного значення $H = 3,5$, що наведене у [5]. Для усіх інших речовин значення константи Генрі, наведені у табл. 2, були обчислені шляхом використання відповідних значень із роботи [15] та застосування формули (13).

4. Висновки

Раніше розроблена система «Повітря» дозволяє проводити розрахунок атмосферного розповсюдження 36-ти хімічних речовин завдяки використанню моделі атмосферного перенесення CALPUFF. Після огляду літературних джерел у даній роботі встановлено значення параметрів для розрахунку сухого і вологого осадження забруднюючих речовин у системі «Повітря» згідно з параметризацією моделі CALPUFF. На підставі аналізу параметризацій моделі визначено параметри, які залежать від виду речовини. Для забруднюючих речовин,

які розповсюджуються у формі аерозолів, тільки один параметр – коефіцієнт вимивання, який є у складі формули розрахунку вологого осадження, залежить від виду речовини. Інші параметри осадження для аерозолів є функцією характеристик розподілу частинок за розмірами, тому не розглядаються у даній роботі. Коефіцієнт вимивання встановлено для усіх видів хімічних речовин – аерозолів та газів, які моделюються системою «Повітря» в залежності від розчинності речовини (для газів) або змішуваності (для аерозолів). Для газів від виду речовини також залежать декілька інших параметрів у формулах розрахунку осадження, а саме: коефіцієнт молекулярної дифузії, коефіцієнт збільшення розчинності, реактивність, опір мезофілу та константа Генрі. Для 17-ти видів газоподібних забруднюючих речовин у роботі встановлені значення відповідних параметрів. Для визначення константи Генрі встановлені відповідності між визначеннями даного параметра у використаних літературних джерелах та у моделі CALPUFF. Для опору мезофілу запропоновано інтерполяційну формулу для розрахунку цього параметра як функції розчинності. Найменше даних знайдено для реактивності та коефіцієнта збільшення розчинності. Тому, за окремими винятками, значення відповідних параметрів задані однаковими для усіх речовин. Більш детальне визначення даних параметрів потребує окремого дослідження.

СПИСОК ДЖЕРЕЛ

1. Kovalets I.V., Maistrenko S.Ya., Khalchenkov A.V., Zagreba T.A., Khurtsilava K.V., Anulich S.N., Bepalov V.P., Udovenko O.I. Povitrya web-based software system for operational forecasting of atmospheric pollution after manmade accidents in Ukraine. *Science and Innovation*. 2017. Vol. 13, N. 6. P. 11–22. DOI: <https://doi.org/10.15407/scin13.06.013>.
2. Kovalets I.V., Maistrenko S.Ya., Khalchenkov O.V., Polonsky O.O., Dontsov-Zagreba T.O., Khurtsilava K.V., Udovenko O.I. Adaptation of the Web-Service of Air Pollution Forecasting for Operation within Cloud Computing Platform of the Ukrainian National Grid Infrastructure. *Science and Innovation*. 2021. Vol. 17, N. 1. P. 90–100. DOI: <https://doi.org/10.15407/scine17.01.078>.
3. Sun F., DAI Y., Yu X. Air pollution, food production and food security: A review from the perspective of food system. *Journal of Integrative Agriculture*. 2017. Vol. 16, N. 12. P. 2945–2962. DOI: [https://doi.org/10.1016/S2095-3119\(17\)61814-8](https://doi.org/10.1016/S2095-3119(17)61814-8).
4. Майстренко С.Я., Халченков О.В., Донцов-Загреба Т.О., Беспалов В.П., Хурцилава К.В., Полонський О.О., Ковалець І.В. Веб-система прогнозування атмосферного забруднення в Україні на основі ланцюга моделей прогнозу погоди та атмосферної дисперсії. *Математичні машини і системи*. 2019. № 2. С. 71–79.
5. Scire J.S., Strimaitis D.G., Yamartino R.J. A user's guide for the CALPUFF dispersion model (Version 5). 1998. Earth Tech. Inc., Concord, MA. URL: <http://www.src.com/calpuff/calpuff1.htm>.
6. Stensrud D.J. Parameterization Schemes: Keys to Understand Numerical Weather Prediction Models. Cambridge: University Press, 2007. 459 p.
7. Sehmel G.A. Particle and gas dry deposition – a review. *Atmospheric Environment*. 1980. Vol. 14. P. 983–1011. DOI: [https://doi.org/10.1016/0004-6981\(80\)90031-1](https://doi.org/10.1016/0004-6981(80)90031-1).
8. CALPUFF PROfessional System. Version Beta 5.2.09_08_2006. TRC Environmental Corp. URL: <https://calpuff-pro.software.informer.com>.
9. Manders Groot A.M.M., Segers A.J., Jonkers S. LOTOS-EUROS v2.0 Reference Guide. TNO Report TNO 2016 R10898. TNO Innovation For Life, Utrecht, The Netherlands, 2016. URL: <http://www.lotos-euros.nl/>.
10. Elperin T., Fominykh A., Krasovtsov B. Wet precipitation scavenging of soluble atmospheric trace gases due to chemical absorption in inhomogeneous atmosphere. *Meteorology and Atmospheric Physics*. 2017. Vol. 129. P. 1–15. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00703-016-0449-x>.
11. Jylhä I. Empirical scavenging coefficients of radioactive substances released from Chernobyl. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*. 1991. Vol. 25, N. 2, P. 263–270. DOI: [https://doi.org/10.1016/0960-1686\(91\)90297-K](https://doi.org/10.1016/0960-1686(91)90297-K).
12. Knutson E.O., Fenton D.L. Atmospheric Scavenging of Hydrochloric Acid. Report No. CR-2598. NASA, Washington D.C., US., 1975. URL: <https://ntrs.nasa.gov/citations/19750022597>.

13. Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P. *The Properties of Gases and Liquids* (5ed.). McGraw-Hill, Chicago, US, 2000. 803 p.
14. Liss P., Slater P. Flux of Gases across the Air-Sea Interface. *Nature*. 1974. Vol. 247. P. 181–184. DOI: <https://doi.org/10.1038/247181a0>.
15. Sander R. Compilation of Henry's law constants (version 4.0) for water as solvent. *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2015. Vol. 15. P. 4399–4981. DOI: <https://doi.org/10.5194/acp-15-4399-2015>.
16. Sander R. Modeling Atmospheric Chemistry: Interactions between Gas-Phase Species and Liquid Cloud/Aerosol Particles. *Surveys in Geophysics*. 1999. Vol. 20. P. 1–31. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1006501706704>.

Стаття надійшла до редакції 12.05.2022