

УДК 551.511.32+551.516.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИОНОВ НА ДИНАМИКУ ФОРМИРОВАНИЯ АТМОСФЕРНОГО АЭРОЗОЛЯ

© 2021 г. А. Е. Алоян^а, А. Н. Ермаков^{б, *, **, **}, В. О. Аругян^а

^аИнститут вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН, ул. Губкина, 8, Москва, 119333 Россия

^бИнститут энергетических проблем химической физики РАН им. В.Л. Тальрозе ФИЦ ХФ им. Н.Н. Семёнова РАН, Ленинский просп., 38, корп. 2, Москва, 119334 Россия

*e-mail: ezmakr2010@yandex.ru

**e-mail: polclouds@yandex.ru

Поступила в редакцию 07.05.2020 г.

После доработки 03.09.2020 г.

Принята к публикации 14.10.2020 г.

В работе описана новая численная модель переноса и трансформации в атмосфере газовых и аэрозольных примесей с учетом процессов фотохимии, нуклеации с участием нейтральных молекул и ионов, а также конденсации/испарения и коагуляции. Приводятся результаты расчетов временной изменчивости счетных концентраций, спектра аэрозольных частиц в атмосфере, а также скоростей процессов нуклеации. Полученные применительно к северному полушарию и зимнему времени результаты указывают на значимую роль процесса ионной нуклеации в формировании атмосферного аэрозоля. При этом наряду с уровнем ионизации воздуха ключевыми факторами, определяющими динамику ионной нуклеации, являются также температура и относительная влажность.

Ключевые слова: численная модель, атмосфера, бинарная нуклеация, ионная нуклеация, аэрозольные частицы

DOI: 10.31857/S0002351521010028

ВВЕДЕНИЕ

Исследования формирования частиц аэрозоля остаются актуальными в физике и химии атмосферы. Их участие в рассеянии и поглощении солнечного излучения, а также в гетерогенных химических реакциях сказывается на климате и содержании в воздухе малых примесей [1–3]. Ранее в [4–6] нами сообщалось о построении численной модели переноса многокомпонентных газовых и аэрозольных микропримесей в обоих полушариях с учетом химических и кинетических процессов их трансформаций, а также бинарной нуклеации паров воды и серной кислоты и последующих процессов конденсационного роста частиц и их коагуляции. В последние годы все большее внимание привлекают процессы формирования аэрозольных частиц с участием атмосферных ионов [1]. Цель данной работы – дополнить численную модель [4–6] блоком процессов нуклеации с участием ионов и проследить за влиянием этого процесса на высотный профиль концентрации частиц сульфатного аэрозоля в атмосфере.

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ АЭРОЗОЛЯ

Расчеты пространственно-временной структуры формирующихся частиц аэрозоля в атмосфере

выполнялись в системе координат (λ, ψ, z) , где λ – долгота, ψ – дополнение до широты, z – высота [4–6]. Основные уравнения для скорости изменения концентраций газовых примесей и аэрозолей имеют следующий вид [4–6]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{u}{a \sin \psi} \frac{\partial C_i}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial C_i}{\partial \psi} + w \frac{\partial C_i}{\partial z} = \\ = F_{\text{gas}} - P_{\text{nucl}} - P_{\text{cond}} + P_{\text{phot}} + \\ + \frac{\partial}{\partial z} v \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{1}{a^2 \sin^2 \psi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \frac{\partial C_i}{\partial \lambda} + \\ + \frac{1}{a^2 \sin \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \mu \sin \psi \frac{\partial C_i}{\partial \psi}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + \frac{u}{a \sin \psi} \frac{\partial \varphi_k}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial \varphi_k}{\partial \psi} + (w - w_g) \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} = \\ = F_{\text{aer}} + P_{\text{cond}} + P_{\text{coag}} + P_{\text{nucl}} + \\ + \frac{\partial}{\partial z} v \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} + \frac{1}{a^2 \sin^2 \psi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \frac{\partial \varphi_k}{\partial \lambda} + \\ + \frac{1}{a^2 \sin \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \mu \sin \psi \frac{\partial \varphi_k}{\partial \psi}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь C_i ($i = 1, \dots, N_g$), φ_k ($k = 1, \dots, N_a$) – концентрации газовых примесей и аэрозолей; N_g и N_a – число газовых компонент и аэрозольных фракций соот-

ветственно; (u, v, w) — компоненты вектора скорости ветра в направлениях λ, ψ, z соответственно; w_g — скорость гравитационного оседания; a — средний радиус Земли; μ и ν — коэффициенты турбулентного обмена в горизонтальном и вертикальном направлениях соответственно; F_{gas} и F_{aer} — источники газовых примесей и аэрозолей; P_{nuc1} , P_{cond} , P_{coag} и P_{phot} — операторы нуклеации, конденсации, коагуляции и фотохимической трансформации соответственно. В данной работе наряду с бинарной нуклеацией паров воды и серной кислоты (J_{byn} , $\text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$) рассматривался процесс их нуклеации и за счет атмосферных ионов (J_{ion} , $\text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$). Уравнения (1)–(2) рассматриваются в области $D_t = G \times [0, T]$, где $G = S \times [0, H]$, $S = \{(\lambda, \psi): 0 \leq \lambda \leq 2\pi, 0 \leq \psi \leq \pi\}$, H — верхняя граница расчетной области. На боковых границах задаются условия периодичности всех функций по долготе, а на полюсах предполагается ограниченность функций по ψ .

Уравнения переноса и трансформации многокомпонентных газовых примесей и аэрозолей в атмосфере решались в границах заданной расчетной области. На боковых границах задавались условия периодичности всех функций по долготе, а на полюсах предполагалась ограниченность функций по ψ . На поверхности земли ($z = h$) поглощение газовых примесей рассчитывалось с учетом суммы аэродинамического сопротивления, квазиламинарного сопротивления приземного слоя молекулярной диффузии и сопротивления поверхностному осаждению.

Для задания краевого условия на первом расчетном уровне (на верхней границе приземного слоя атмосферы) $z = h$, сопротивление вхождению примеси на поверхности земли задавалось суммой трех слагаемых: аэродинамического сопротивления r_a , квазиламинарного сопротивления приземного слоя r_b , возникающего вследствие молекулярной диффузии вблизи Земли, и поверхностного сопротивления r_c , обусловленного поверхностным осаждением. Потоки примесей в приземном слое атмосферы рассматривались в виде:

$$v \frac{\partial C_i}{\partial z} = \frac{1}{r_a + r_b + r_c} (C_i - C_{i, \text{surf}}) - \text{для газа}, \quad (3)$$

$$v \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} = \frac{\varphi_k - \varphi_{k, \text{surf}}}{r_a + r_b + r_c} + w_g \varphi_k - \text{для аэрозоля}, \quad (4)$$

где $r_b = \frac{2}{\kappa u_*} \left(\frac{S_c}{\text{Pr}} \right)^{2/3}$, $S_c = 1.5 \times 10^{-5} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$, $\text{Pr} = 0.71$ — число Прандтля, u_* — динамическая скорость.

Аэродинамическое сопротивление вычисляли по формуле $r_a = \frac{1}{c_u c_\theta |u|}$. Коэффициент поверх-

ностного сопротивления r_c над сушей определяется из модели, описывающей перенос примесей в почве и деятельном слое океана с одновременным использованием потоков на разделе атмосфера—почва и атмосфера—океан. Для определения коэффициентов горизонтального и вертикального турбулентного обмена используется метод, предложенный в [7].

Ионная нуклеация

Эксперимент показывает, что в процессе ионной нуклеации участвуют по преимуществу отрицательные ионы [8, 9]. В присутствии в воздухе паров H_2SO_4 ионы $\text{NO}_3^-(\text{HNO}_3)_x(\text{H}_2\text{O})_y$ преобразуются в кластерные ионы HSO_4^- , рост размеров которых в процессах кластеризации и рекомбинации с противоионами приводит, в конечном итоге, к зародышам аэрозольных частиц. Скорость нуклеации (J_{ion}) рассчитывалась как поток частиц, проходящих через критический размер зародыша (r_{cr}). Одновременно возникающие в воздухе нейтральные кластеры, включающие молекулы серной кислоты и воды, коагулируют как с нейтральными, так и с отрицательно заряженными кластерами. При этом захват последних нейтральными аэрозольными частицами ведет к снижению J_{ion} [10].

В кинетической модели ионной нуклеации [10] формирования аэрозоля с участием атмосферных ионов первичные ионы (N_2^+ , O_2^+ , H^+ , O^+) и электроны преобразуются в кластерные ионы протонированных оснований ($\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{NH}_4^+(\text{H}_2\text{O})_n$ и др.), а также сопряженные основания сильных кислот (например, $\text{NO}_3^-(\text{HNO}_3)_x(\text{H}_2\text{O})_y$) [8]. Их свободные энергии образования (энергии Гиббса), измеренные с использованием масс-спектральных методов, а константы скорости обратимых процессов кластеризации, рассчитанные с применением квантовой химии [8, 9], открывают возможность количественного рассмотрения влияния скорости ионной нуклеации на динамику формирования аэрозольных частиц и их концентраций в атмосфере. При этом прямое вычисление J_{ion} в значительной мере снижает вычислительные ресурсы [10]. В то же время известные параметризованные выражения для J_{ion} с большим числом входных параметров [11] приводят нередко к их некорректным значениям [12]. Недавно в [10] сообщалось, что расчеты динамики этих ионных процессов по ходу моделирования переноса газовых и аэрозольных микропримесей удается совместить в рамках единой модели, не затрагивая при этом вычислительных ресурсов. Такой подход учета ионной нуклеации при моделировании формирова-

ния аэрозоля в верхней тропосфере используется и в данной работе.

Для интегрирования блока этих процессов в численную модель нами заимствовались сводка рассчитанных значений $J_{\text{ион}}$ [10], отвечающих стационарным условиям при характерных для атмосферы концентрациях нуклеирующих молекул серной кислоты ($[\text{H}_2\text{SO}_4]$), температуре (T , К), относительной влажности, скорости ионизации (J , $\text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$) и общей поверхности аэрозольных частиц (S , $\text{мкм}^2/\text{см}^3$). Была заимствована и подпрограмма интерполяции величин этих параметров при промежуточных их значениях. Найденные таким образом $J_{\text{ион}}$ использовались при численном решении кинетических уравнений (1), (2), что и позволило судить о пространственно-временной изменчивости распределения концентраций зародышей и динамике их превращений в аэрозольные частицы.

Модель фотохимической трансформации

В качестве предшественников частиц т.н. вторичного аэрозоля [1] рассматривались процессы фотоокисления эмитируемых с поверхности серосодержащих компонентов антропогенного и биогенного происхождения, в том числе эмитируемого океанами диметилсульфида (CH_3SCH_3). Всего учитывалось 72 индивидуальных газовых компонента [5].

Ядра конденсации

Для описания изменчивости в атмосфере их концентраций и спектра размеров в расчетах использовались 20 дискретных интервалов от ≈ 4 нм до 0.58 мкм. Отметим в этой связи, что по данным натуральных экспериментов счетная концентрация ядер конденсации изменяется по высоте в пределах от ~ 10 до нескольких сотен частиц в 1 см^3 [13]. В настоящих расчетах было принято, что концентрация ядер конденсации с ростом высоты остается неизменной и составляет $1 \times 10^9 \text{ м}^{-3}$ (10^3 см^{-3}). При этом считалось, что ядра конденсации представляют собой инертные частицы, превращающиеся в сульфатный аэрозоль лишь после оседания на них молекул серной кислоты и воды или захвата мелких частиц сульфатного аэрозоля, возникающих в процессе нуклеации. Распределение концентрации ядер конденсации по размерам задавалось в диапазоне от 0.18 до $9.98 \times 10^8 \text{ м}^{-3}$ [14]. Суммарная удельная поверхность ядер конденсации в начальный момент составила $\approx 0.26 \text{ мкм}^2/\text{м}^3$. По данным [10] это сводит к минимуму их влияние на динамику ионной нуклеации.

Численные эксперименты выполнялись применительно к точкам, расположенным в умеренных широтах (120° E , 70° N ; 10° E , 50° N) и вблизи

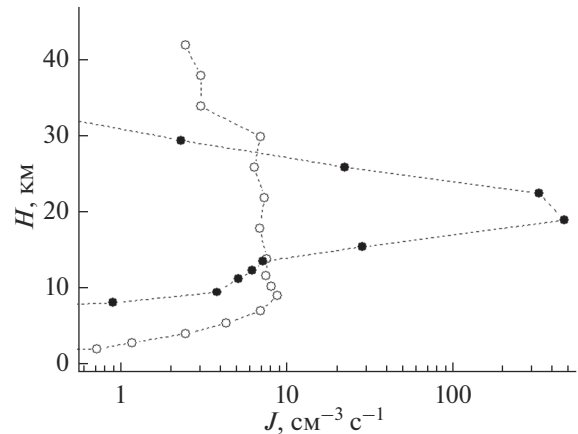


Рис. 1. Высотный профиль скорости нуклеации (J , $\text{см}^{-3} \text{ с}^{-1}$). Зимнее время (январь 2002 г.). Светлые кружки – умеренные широты (10° E , 50° N), темные кружки – тропики (5° E , 5° N).

тропиков (5° E , 5° N) при следующих входных параметрах. Число уровней по вертикали – 20 (от 100 до 46000 м). В экспериментах вычислялись скорость бинарной нуклеации паров H_2O и H_2SO_4 , необходимая для нуклеации пороговая концентрация H_2SO_4 , скорость нуклеации, критический размер кластера, а также временная изменчивость функции распределения частиц по размерам. Метеорологическая информация заимствовалась из базы данных Европейского центра по среднесрочным прогнозам (ECMWF) для января 2002 г.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 в качестве примера приводятся рассчитанные высотные профили скорости нуклеации паров воды и серной кислоты в зимнее время (январь 2002 г.) в умеренных широтах (10° E , 50° N) и вблизи тропиков (5° E , 5° N). Их скорости рассчитывались при этом как сумма $J_{\text{ион}}$ и J_{byn} . Оба рассчитанных таким образом высотных профиля скорости нуклеации обнаруживает максимумы (≈ 7 и $\approx 5000 \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$) на высотах 10.4 и 18 км соответственно. Положение максимумов $J_{\text{byn}} + J_{\text{ион}}$ оказывается в этих точках близким к положению минимумов в высотном профиле температуры (≈ 210 и $\approx 193 \text{ K}$), что говорит о решающей роли температуры в процессе нуклеации. При этом сдвиг максимумов $J_{\text{byn}} + J_{\text{ион}}$ над тропической зоной к большим высотам обусловлен ускорением бинарной нуклеации, вызванным понижением температуры при подъеме над подстилающей поверхностью.

На рис. 2 показано, как изменяется вид спектра частиц ядер конденсации на высотах 10.4 и 18 км в умеренных широтах и вблизи тропиков. Эти рас-

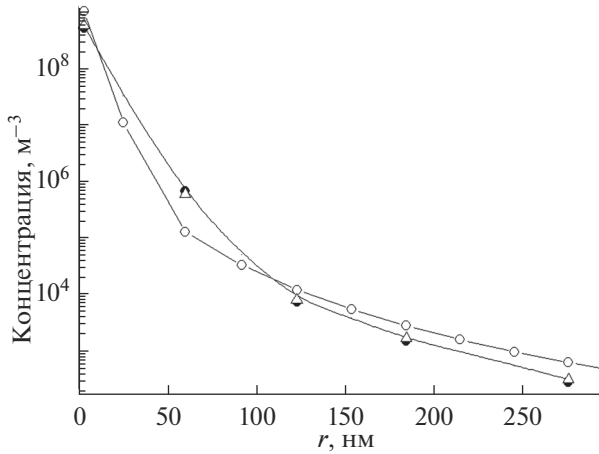


Рис. 2. Спектр аэрозольных частиц в атмосфере над умеренными широтами (10.4 км) и над тропиками (18 км) спустя 47 ч после инициализации модели. Светлыми кружками показан спектр ядер конденсации.

четыре отвечают виду спектра через 48 ч после инициализации модели. Рассматриваемые изменения вида спектра частиц вызваны генерацией в воздухе мельчайших новых частиц при нуклеации паров воды и серной кислоты и их захватом ядрами конденсации. Отчетливо видно снижение

счетной концентрации частиц аэрозоля с радиусом меньшим 11 нм и большим 110 нм, а также рост концентраций частиц промежуточных размеров за прошедшее время. При этом, несмотря на почти ≈ 50 кратный прирост скорости нуклеации в тропической зоне, характер изменений спектра частиц в умеренных широтах и вблизи тропиков и их абсолютные концентрации остаются практически одинаковыми.

На рис. 3 в качестве примера показаны кинетические кривые изменения концентрации аэрозольных частиц для умеренных широт (120° E , 70° N) на высотах 4.2, 10.4 и 18 км. Эти расчеты отвечают концентрациям частиц по истечении 24 ч спустя инициализации модели. Видно, что на высоте 4.2 км концентрации частиц в первой и в третьей модах (см. вставку на рисунке) несмотря на низкие температуры ($\approx 243 \text{ K}$) остаются практически неизменными. При этом расчеты указывают на возникновение зародышей частиц лишь в процессе ионной нуклеации ($J \approx J_{\text{ion}} \approx 3.5 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$). Этот процесс не сопровождается, однако, заметные изменения концентраций аэрозольных частиц первой и других мод в таких условиях. Их концентрации остаются близкими к первоначальным концентрациям ядер конденсации. Это говорит, во-первых, о низкой скорости процесса гетерогенной нуклеации паров серной кислоты и воды

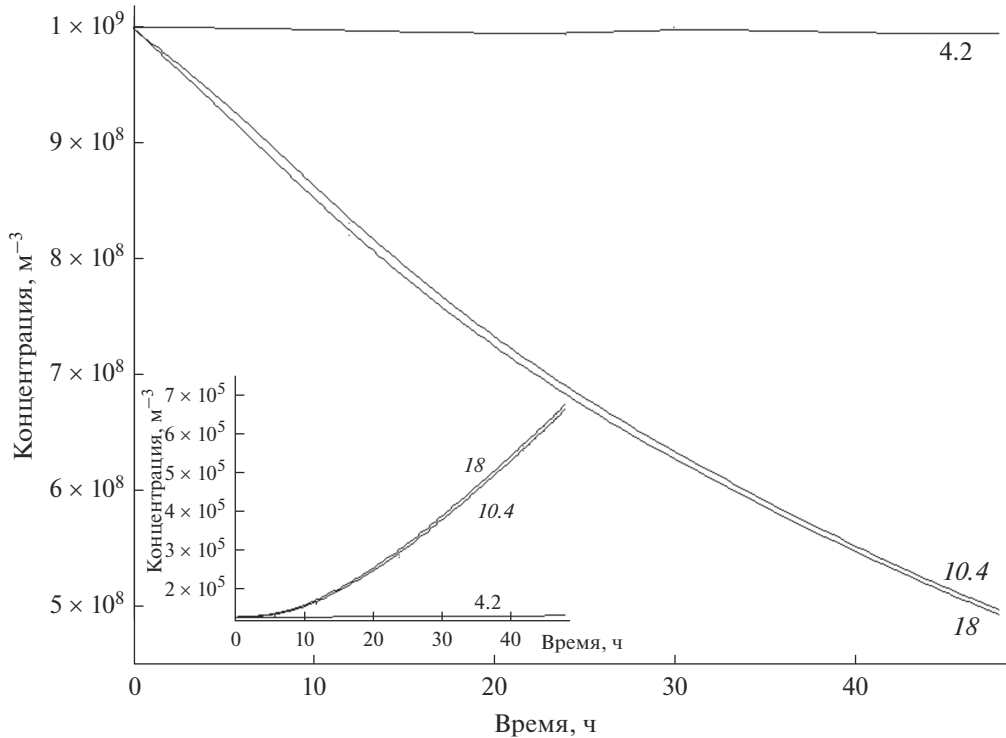


Рис. 3. Кинетические кривые изменчивости концентрации частиц атмосферного аэрозоля в умеренных широтах (первая мода, $r = 3.45 \text{ мкм}$). На вставке показаны кинетические кривые изменчивости концентрации частиц третьей моды (60 нм). Цифрами показаны высоты (км) над подстилающей поверхностью.

на ядрах конденсации. При этом следует иметь в виду, что оценка равновесного давления паров H_2SO_4 в составе осевшего на поверхности частиц композита, включающего молекулы воды и серной кислоты ($\approx 50\%/50\%$), оказывается на много порядков более низким ($\approx 10^{-19}$ атм¹ [15]) чем уровень парциального давления H_2SO_4 ($\approx 10^{-13}$ атм). Во-вторых, на это указали и результаты автономных расчетов, полагая $J_{\text{byn}} = J_{\text{ion}} = 0$. Эти расчеты указали, наконец, и на малое влияние процессов коагуляции с участием ядер конденсации.

Ситуация меняется при переходе к большим высотам, т.е. к условиям более низких температур и больших скоростей нуклеации, см. кривые 10.4 (≈ 206 К) и 18 (≈ 211 К) на рис. 3. Обе эти кривые демонстрируют значительную убыль концентрации частиц первой моды и одновременно заметный прирост концентрации частиц третьей моды (см. на вставке). И это несмотря на чуть больший, чем двукратный рост скорости нуклеации. Налицо существование критических условий формирования частиц аэрозоля в атмосфере, отвечающего переходу через пороговое содержание в воздухе газовых молекул H_2SO_4 ($[\text{H}_2\text{SO}_4]_{\text{threshold}} \approx 2.5 \times 10^6 \text{ см}^{-3}$). Подобная картина убыли и прироста концентрации частиц 1-й и 3-й мод в умеренных широтах наблюдается и на высоте 18 км, отвечающей близкой к максимальной скорости нуклеации, см. рис. 1. Эти данные во избежание загромождения рис. 3 не приводятся. При этом в сравнении данными, отвечающими 10.4 км, отмечается также небольшое снижение убыли концентрации частиц в первой моде. Этот результат говорит о маскирующем убыль частиц пополнении новыми частицами первой моды за счет их генерации в процессах нуклеации. Об этом свидетельствуют и данные вставки, также свидетельствующие о небольшом приросте концентрации частиц третьей моды. Эти данные говорят также о преимущественном росте частиц этой моды не путем непосредственного захвата ими мелких частиц, возникающих в процессах нуклеации. Рост частиц третьей и частиц последующих мод происходит, по-видимому, в результате межмодового перехода, вызванного ростом размеров частиц первой моды, обусловленного захватом мелких частиц, возникающих в процессах нуклеации. С этим, возможно, связан и практически неизменный вид спектра аэрозольных частиц в умеренных широтах и вблизи тропиков. Из данных вставки на рис. 3 следует, что характерное время установления близкой к стационарной концентрации мелких новых частиц в воздухе ≈ 10 –15 ч. Продолжительность этого промежутка времени оценивали, экстраполируя касательную к кривым роста концентрации частиц

3-й моды к начальной их концентрации. Это время остается почти неизменным и при более низких температурах. Это значит, что фактором, определяющим концентрацию новых частиц, наряду со скоростью нуклеации, оказывается, по-видимому, и концентрация ядер конденсации первой моды.

Похожие данные о динамике изменения концентраций аэрозольных частиц первой и третьей мод были получены для высот 4.2, 10.4 и 18 км и вблизи тропиков, см. рис. 4. Как и ранее, в умеренных широтах заметных изменений концентраций аэрозоля на высоте 4.2 км не происходит. Это связано с недостатком содержания в воздухе газовых молекул H_2SO_4 уступающего $[\text{H}_2\text{SO}_4]_{\text{threshold}}$ над тропиками. При переходе через “порог” скорость нуклеации резко нарастает, что обеспечивает формирование мельчайших частиц аэрозоля захватываемых частицами ядер конденсации. При этом на высоте 18 км отмечается также прирост содержания частиц первой моды в сравнении с их содержанием на высоте 10.4 км. Это говорит о пополнении частиц первой за счет процесса нуклеации и последующего конденсационного роста этих частиц, маскирующего их убыль за счет межмодового перехода $1 \rightarrow 3$.

Как соотносятся рассчитанные нами данные о динамике изменения концентрации аэрозольных частиц с результатами наблюдений в атмосфере? Оценка динамики этого процесса в природных условиях по данным настоящих расчетов проводилась нами по результатам измерений самой мелкой фракции частиц, контроль которых в зимнее время (январь, 1989) проводился над Laramie, Wyoming (41° N) на высоте 10.4 км. По данным [14] концентрации “ядер конденсации” ($r \geq 10$ нм) составили $\sim 50 \text{ см}^{-3}$ ($\sim 5 \times 10^7 \text{ м}^{-3}$). Их концентрация заимствовалась при этом из вида высотного профиля концентраций этих частиц, а не приводимого в публикации ее численного значения при $H = 10400$ м, отвечающего, по-видимому, случайному всплеску. Из данных наших оценок динамики межмодового перехода ($1 \rightarrow 3$), обуславливающего рост концентраций частиц третьей моды в умеренных широтах (см. рис. 3), следует, что скорость этого процесса составляет: $\approx 5 \times 10^5 / 1.8 \times 10^5 \approx 3 \text{ м}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$. Здесь $5 \times 10^5 \text{ м}^{-3}$ – прирост концентрации частиц третьей моды, а $1.8 \times 10^5 \text{ с}$ – промежуток времени, за который достигается этот прирост. Считая, что рассматриваемые натурные данные отвечают стационарным условиям, для времени установления стационарной концентрации частиц размером $r \geq 10$ нм над Laramie будем иметь отсюда $\tau \geq 5 \times 10^7 / 3 \geq 2 \times 10^7 \text{ с}$, т.е. около одного года. Отметим, что эта оценка выполнена в приближении отсутствия влияния частиц аэрозоля на динамику процесса ионной нуклеации. При учете их негативного влияния

¹ Приведенная оценка равновесного давления паров H_2SO_4 производилась с учетом влияния размеров ядер конденсации первой моды [1].

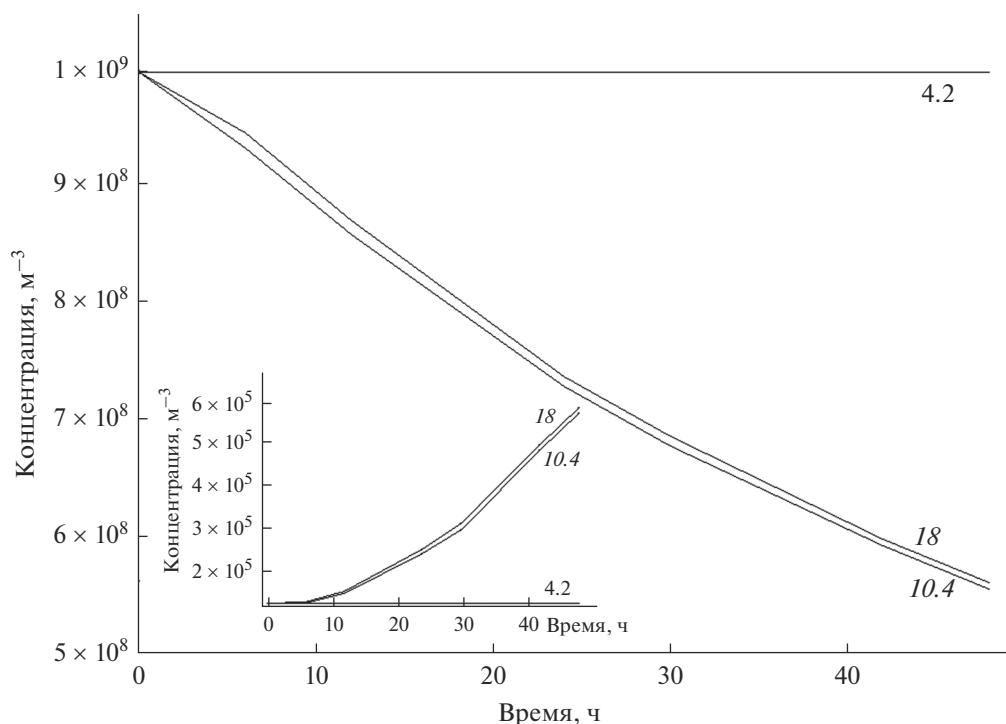


Рис. 4. Кинетические кривые изменчивости концентрации частиц атмосферного аэрозоля над тропиками (первая мода, $r = 3.45$ мкм). На вставке показаны кинетические кривые изменчивости концентрации частиц третьей моды (60 нм). Цифрами показаны высоты (км) над подстилающей поверхностью.

этот процесс может занять гораздо больший промежуток времени.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе сообщается о построении физически полной модели глобального переноса многокомпонентных газовых примесей и аэрозолей в обоих полушариях и сопутствующих физико-химических процессах. Наряду с бинарной нуклеацией паров воды и серной кислоты учитывалась и их нуклеация с участием атмосферных ионов. Приводятся результаты расчетов высотных профилей счетной концентрации вторичных аэрозольных частиц и временной изменчивости их спектра. По этим данным проведены оценки динамики межмодового перехода при формировании спектра частиц атмосферного аэрозоля и скорости ионной нуклеации. Полученные в работе результаты указывают на определяющую роль процесса нуклеации с участием атмосферных ионов при формировании частиц вторичного аэрозоля в умеренных широтах в зимнее время. При этом определяющими факторами динамики этого процесса в разных географических точках оказываются температура, скорость ионизации в атмосфере и относительная влажность.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований 18-05-00289 и 19-05-50007 (Микромир), а также при финансировании Госзаданий ИВМ РАН и ИНЭП ХФ РАН им. В.Л. Тальрозе (тема АААА-0047-2018-0012).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Seinfeld J.H., Pandis S.N.* Atmospheric Chemistry and Physics. From Air Pollution to Climate Change. Wiley-Interscience: New York, 1997.
2. *Akimoto H.* Atmospheric Reaction Chemistry. Springer, 2016.
3. *Lowe D., MacKenzie R.* Review of polar stratospheric cloud microphysics and chemistry // *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.* 2008. V. 70. № 1. P. 13–40.
4. *Алоян А.Е., Ермаков А.Н., Арутюнян В.О.* Формирование сульфатных аэрозолей в тропосфере и нижней стратосфере. Исследование возможной стабилизации климата с помощью новых технологий. М.: Росгидромет, 2012. С. 75–98.
5. *Алоян А.Е., Ермаков А.Н., Арутюнян В.О.* Аэрозоль в верхней тропосфере и нижней стратосфере. Сульфатные частицы в северных широтах // *Оптика атмосферы и океана.* 2018. Т. 31. № 2. С. 136–142.
6. *Aloyan A.E.* Mathematical modeling of the interaction of gas species and aerosols in atmospheric dispersive systems // *Russ. J. Num. Anal. Math. Model.* 2000. 15(1–4). P. 211–224.

7. *Kurihara Y., Televa R.E.*, Structure of tropical cyclone developed in three-dimensional numerical simulation model // *J. Atmos. Sci.* 1974. V. 31. № 5. 893–919.
8. *Ferguson E.E.* Ion-molecule reactions in the atmosphere, *Kinetics of Ion-Molecule Reactions*. Ed. by *P. Ausloos*. Springer, Boston, 1979. P. 377–403.
9. *Froyd K.D., Lovejoy E.R.* Experimental thermodynamics of cluster ions composed of H_2SO_4 and H_2O . 1. Positive ions // *J. Phys. Chem. A* 2003. V. 107 № 45. P. 9800–9811.
10. *Yu F.* Ion-mediated nucleation in the atmosphere: Key controlling parameters, implications, and look-up table // *Geophys. Res.* 2010. V. 115. D03206. <https://doi.org/10.1029/2009JD012630>
11. *Modgil M.S., Kumar S., Tripathi S.N., Lovejoy E.R.* A parameterization of ion-induced nucleation of sulphuric acid and water for atmospheric conditions // *J. Geophys. Res.* 2005. V. 110. P. D19205. <https://doi.org/10.1029/2004JD005475>
12. *Yu F., Turco R.P.* Case studies of particle formation events observed in boreal forests: Implications for nucleation mechanisms // *Atmos. Chem. Phys.* 2008. V. 8. P. 6085–6102.
13. *Hofmann D. J.* Measurement of the concentration nuclei profile to 31 km in the Arctic in January and comparison with Antarctic measurements // *Geophys. Res. Lett.* 1990. V. 17. №4. P. 357–360
14. *Алоян А.Е.* Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: Наука, 2008.
15. <http://www.aim.env.uea.ac.uk/aim/aim.php>.

Modeling the Ion Effect on the Dynamics of Atmospheric Aerosol Formation

A. E. Aloyan¹, A. N. Yermakov^{2,*,**}, and V. O. Arutyunyan¹

¹*Marchuk Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*Institute of Energy Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

*e-mail: ezmakr2010@yandex.ru

**e-mail: polclouds@yandex.ru

This paper describes a new numerical model of transport and transformation of gaseous and aerosol species in the atmosphere incorporating photochemistry, nucleation with neutral molecules and ions, condensation/evaporation, and coagulation. The temporal variations in aerosol number concentrations and size distributions in the atmosphere as well particle nucleation rates have been calculated. The results obtained for the northern hemisphere in winter conditions indicate a significant role of the process of ion nucleation in the formation of aerosol. In addition to air ionization, temperature and relative humidity are also among key factors determining the dynamics of ion nucleation.

Keywords: numerical model, atmosphere, binary nucleation, ion-mediated nucleation, aerosol