

УДК 551.511.32+551.516.6

О ВЛИЯНИИ АТМОСФЕРНЫХ ИОНОВ НА ОБРАЗОВАНИЕ АЭРОЗОЛЯ В ТРОПОСФЕРЕ: ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

© 2023 г. А. Е. Алоян^а, *, А. Н. Ермаков^б, **, В. О. Арутюнян^а

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

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

*e-mail: ezmakr2010@yandex.ru

**e-mail: polclouds@yandex.ru

Поступила в редакцию 13.03.2023 г.

После доработки 07.04.2023 г.

Принята к публикации 26.04.2023 г.

Построена новая математическая модель глобального переноса многокомпонентных газовых примесей и аэрозолей, включающая формирование в атмосфере сульфатных аэрозолей в обоих полушариях. Расчеты скоростей нуклеации и счетных концентраций частиц выполнялись применительно к зимнему периоду в тропосфере в рамках единой модели с учетом химических и кинетических процессов трансформации (фотохимия, нуклеация, конденсация/испарение и коагуляция). При этом наряду с бинарной нуклеацией паров серной кислоты и воды рассматривалось также образование зародышей частиц и с участием атмосферных ионов. Полученные результаты указывают на значимую роль процесса ионной нуклеации в формировании аэрозоля в Северном и Южном полушариях в зимнее время. Наряду с уровнем ионизации воздуха, факторами определяющими динамику ионных процессов и их влияние на пространственно-временное распределение аэрозольных частиц в атмосфере, являются температура, относительная влажность, а также содержание в воздухе паров серной кислоты и воды.

Ключевые слова: численная модель, атмосфера, аэрозоль ионная нуклеация, бинарная нуклеация

DOI: 10.31857/S000235152304003X, **EDN:** YMVGXF

ВВЕДЕНИЕ

Исследования формирования аэрозоля и мониторинг аэрозольных частиц в атмосфере остаются приоритетными задачами. Это вызвано участием частиц аэрозоля в рассеянии и поглощении солнечного излучения, а также в гетерогенных химических реакциях (ГХР), что сказывается как на климате, так и на содержании в воздухе малых примесей. Несмотря на важность климатообразующего потенциала аэрозольных частиц, их влияние на тепловой баланс атмосферы остается неопределенным [Lowe and MacKenzie, 2008; Akimoto, 2016]. Причины – большое разнообразие компонентов аэрозольных частиц, различия их морфологии [Zuend and Seinfeld, 2012] и др. В ряду атмосферных частиц ключевую роль в атмосфере играет сульфатный аэрозоль (СА), возникающий при совместной конденсации паров воды и серной кислоты и играющий роль ядер конденсации. На поверхности и в объеме СА в атмосфере происходят ГХР.

При разработке моделей атмосферы принципиально важен корректный учет динамики фор-

мирования СА в тропосфере и нижней стратосфере. Их образование представляет собой сложную сумму процессов нуклеации, конденсации/испарения, коагуляции с участием паров воды и серной кислоты, а также фотохимической трансформацией эмитируемых в атмосфере газовых примесей. Изменчивость динамики каждого из них при колебаниях метеоусловий приводит к изменению химического и фазового состава СА в атмосфере. При этом равновесие в дисперсной системе устанавливается достаточно медленно, и в расчетах динамики формирования частиц СА и прогноза их свойств необходимо использовать неравновесную функцию распределения частиц по размерам.

Ранее в [Aloyan, 2000; Алоян и др., 2012, 2018] нами сообщалось о построении трёхмерной модели переноса многокомпонентных газовых и аэрозольных микропримесей в Северном полушарии с учетом химических и кинетических процессов их трансформации, а также процессов бинарной нуклеации паров воды и серной кислоты, процессов конденсационного роста и коагуляции

частиц. Натурные эксперименты показывают, однако, что рассматриваемый механизм генерации зародышей вторичных частиц аэрозоля не объясняет нуклеационных всплесков их образования [Kirkby et al., 2011]. Внимание привлекают также процессы формирования аэрозольных частиц в атмосфере с участием атмосферных ионов. Цель данной работы — дополнить построенную авторами работы трёхмерную модель модулем процессов ионной нуклеации [Aloyan et al., 2021], для оценки влияния ионов на пространственно-временное распределение счетных концентраций сульфатного аэрозоля в атмосфере.

МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ АЭРОЗОЛЯ

Модель глобального переноса многокомпонентных малых газовых примесей и аэрозолей и образования сульфатных аэрозолей в тропосфере и нижней стратосфере рассматривается применительно к сферической Земле в системе координат (λ, ψ, z) , где λ — долгота, ψ — дополнение до широты, z — высота. Основные уравнения для скорости изменения концентраций газовых примесей и аэрозолей имеют следующий вид [Aloyan, 2000; Алоян и др., 2012, 2018]:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} = F_i^{\text{gas}} - P_i^{\text{nucl}} - P_i^{\text{ion-nucl}} - P_i^{\text{cond}} + P_i^{\text{chem}} + \frac{\partial}{\partial x_j} K_{ij} \frac{\partial C_i}{\partial x_j}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + (u_j - \delta_{j3} w_g) \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_j} = F_k^{\text{aer}} + P_k^{\text{nucl}} + P_k^{\text{ion-nucl}} + P_k^{\text{cond}} + P_k^{\text{coag}} + P_k^{\text{chem}} + \frac{\partial}{\partial x_j} K_{kj} \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_j}. \quad (2)$$

Здесь u_j ($j = \overline{1,3}$) ($u_1 = u, u_2 = v, u_3 = w$) ($x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$) — компоненты вектора скорости ветра в направлениях x, y, z соответственно; C_i ($i = 1, \dots, N_g$) — концентрация газовых веществ, φ_k ($k = 1, \dots, N_a$) — концентрация аэрозольных частиц соответствующей фракции, N_g и N_a — число газовых веществ и аэрозольных фракций соответственно, w_g — скорость гравитационного оседания; F_i^{gas} и F_k^{aer} — источники газовых веществ и аэрозолей; $P_i^{\text{nucl}}, P_i^{\text{ion-nucl}}, P_i^{\text{cond}}, P_k^{\text{coag}}, P_k^{\text{chem}}$ — операторы гомогенной и ионной нуклеации, конденсации, коагуляции и фотохимической трансформации соответственно.

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 . Начальные условия (при $t = 0$) задаются в следующем виде:

$$C(x, y, z) = C_i^b(x, y, z), \quad (3)$$

$$\varphi(x, y, z) = \varphi^b(x, y, z). \quad (4)$$

На боковых границах области для функций задаются следующие краевые условия:

$$C|_{\Omega} = C^b, \quad \varphi|_{\Omega} = \varphi^b \quad \text{при } u_n < 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial C}{\partial n}|_{\Omega} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial n}|_{\Omega} = 0, \quad \text{при } u_n \geq 0. \quad (6)$$

Здесь Ω — боковая поверхность, n — внешняя нормаль к Ω , u_n — нормальная компонента вектора скорости, C^b, φ^b — фоновые концентрации газовых веществ и аэрозолей соответственно.

Уравнения переноса и трансформации многокомпонентных газовых примесей и аэрозолей в атмосфере решались в границах заданной расчетной области. 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:

$$v \frac{\partial C_i}{\partial z} = \frac{1}{r_a + r_b + r_c} (C_i - C_{i,\text{surf}}) \quad \text{— для газа,} \quad (7)$$

$$v \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} = \frac{\varphi_k - \varphi_{k,\text{surf}}}{r_a + r_b + r_c} + w_g \varphi_k \quad \text{— для аэрозоля,} \quad (8)$$

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 вычислялось по формуле, приведенной в [Алоян, 2008]. Коэффициент поверхностного 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 [Kurihara and Televa, 1974].

Ионная нуклеация

Эксперименты показывают [Ferguson, 1979; Froyd and Lovejoy, 2003], что в процессе ионной нуклеации участвуют по преимуществу отрицательные ионы, что связано с известным “предпочтением знака” [Kusaka et al., 1995]. 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}) рассчитывается при этом 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 их захват нейтральными аэрозольными частицами ведет к снижению J_{ion} [Yu, 2010].

Применение в трехмерных численных моделях этого алгоритма нахождения J_{ion} встречает, однако, большие сложности в виду необходимости использования огромных вычислительных ресурсов. Поэтому для определения скорости нуклеации, зависящей от концентрации серной кислоты, температуры, относительной влажности, скорости ионизации и площади поверхности предшествующих частиц в данной модели применяется параметризация J_{ion} от этих параметров [Yu, 2010]. Подробное описание модели ионной нуклеации и алгоритме нахождения ее скорости приведено в работе [Yu, 2010].

Модель фотохимической трансформации

В качестве предшественников частиц вторичного аэрозоля 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 [Алоян и др., 2018].

Ядра конденсации

Для описания пространственно-временной изменчивости в атмосфере концентраций ядер конденсации и спектра размеров в расчетах использовались 20 дискретных интервалов от ≈ 3.5 нм до

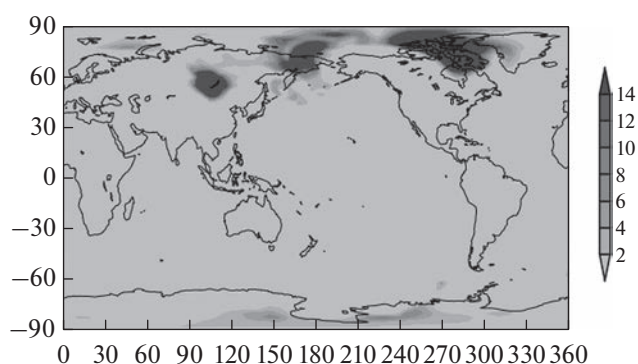


Рис. 1. Глобальное распределение скоростей ионной нуклеации ($\text{см}^{-3} \text{с}^{-1}$) спустя 18 ч. после инициализации модели. Высота над подстилающей поверхностью 4.2 км, зимнее время (январь 2002 г.).

0.58 мкм. Отметим, что по данным натурных экспериментов счетная концентрация ядер конденсации изменяется по высоте в пределах от ~ 10 до нескольких сотен частиц в 1 см^3 [Hofmann, 1990]. При этом считалось, что ядра конденсации представляют собой инертные частицы, превращающиеся в сульфатный аэрозоль лишь при оседании молекул серной кислоты и воды или захвата мелких частиц сульфатного аэрозоля, возникающих в процессах нуклеации. Распределение концентрации ядер конденсации задавалось в диапазоне от 0.18 до $9.98 \times 10^8 \text{ м}^{-3}$ [Алоян, 2008]. Суммарная удельная поверхность ядер конденсации в начальный момент составила $\approx 0.26 \text{ мкм}^2/\text{м}^3$. По данным [Yu, 2010] это сводит к минимуму их влияние на динамику ионной нуклеации.

Численные эксперименты выполнялись применительно к обоим полушариям в разных географических точках в зимнее время в Северном полушарии при следующих входных параметрах. Число уровней по вертикали – 20 (от 100 до 46000 м). В численных экспериментах вычислялись скорость бинарной нуклеации паров H_2O и H_2SO_4 , необходимая для нуклеации пороговая концентрация H_2SO_4 , 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

На рис. 1–3 приводятся результаты расчетов пространственной изменчивости в атмосфере скоростей ионной нуклеации паров воды и серной кислоты. Эти данные для высот 4.2, 7.2 и 10.4 км и зимнего времени отвечают картине спустя 18 часов после инициализации модели. Близкие картины пространственного распределения

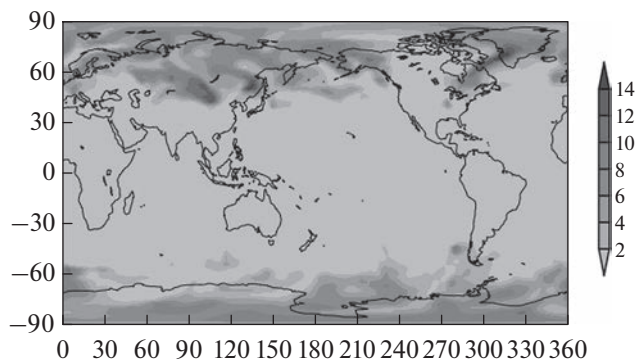


Рис. 2. Глобальное распределение скоростей ионной нуклеации ($\text{см}^{-3} \text{с}^{-1}$) спустя 18 ч. после инициализации модели. Высота над подстилающей поверхностью 7.2 км, зимнее время (январь 2002 г.).

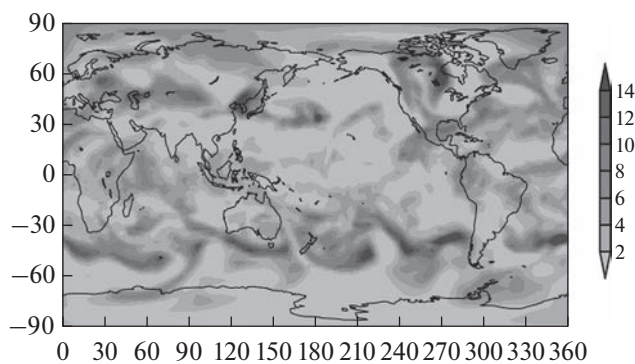


Рис. 3. Глобальное распределение скоростей ионной нуклеации ($\text{см}^{-3} \text{с}^{-1}$) спустя 18 ч. после инициализации модели. Высота над подстилающей поверхностью 10.4 км, зимнее время (январь 2002 г.).

J_{ion} наблюдаются и спустя 6, и 12 ч после инициализации модели, что говорит об установлении близкого к стационарному пространственно-временному распределению J_{ion} в атмосфере.

Из данных расчетов следует, что J_{ion} характеризуется значительная пространственная неоднородность. Так, на высоте 4.2 км образование зародышей частиц с участием ионов осуществляется лишь над районами, располагающимися над озером Байкал, районами Камчатки, а также над регионами, занимающими северо-восток и северо-запад Американского континента. В пределах областей локализации этого процесса в атмосфере скорость генерации в них зародышей меняется более, чем на порядок величины. Появление этих контрастов говорит о высокой чувствительности процесса ионной нуклеации к изменениям метеословий, уровню ионизации и инсоляции, содержанию примесей в атмосфере и т.д. Несмотря на высокий уровень ионизации воздуха и низкие температуры, области образования зародышей

частиц на этой высоте не обнаруживаются в атмосфере над Арктикой и Антарктидой, что говорит о недостатке серосодержащих примесей антропогенного и естественного происхождения в воздухе этих регионов.

При подъеме над подстилающей поверхностью характер неоднородности распределения J_{ion} заметно изменяется. В противовес описанному выше на высоте 7.2 км области протекания процесса ионной нуклеации занимают практически всю атмосферу и над Арктикой, и над Антарктикой. При этом в пределах этих областей также просматриваются ощутимое различие J_{ion} . При дальнейшем подъеме до 10.4 км генерация зародышей частиц в процессе ионной нуклеации, захватывают практически всю атмосферу при одновременном снижении различий J_{ion} в очагах формирования зародышей частиц, свидетельствуя, таким образом, о почти равномерном участии ионов в процессе нуклеации на этой высоте.

Причины выявленной неоднородности пространственного распределения J_{ion} видятся в изменчивости температуры, относительной влажности, содержании в воздухе паров серной кислоты и воды, а также различиях уровня ионизации. Так, влияние ионизации на J_{ion} отчетливо проявляется на высоте 7.2 км в локализации областей генерации зародышей частиц над Арктикой и Антарктикой, см. рис. 2, т.е. в областях с максимальным уровнем ионизации воздуха [Yu, 2010]. Влияние загрязнения атмосферы парами серной кислоты, возникающими при окислении диоксида серы, диметилсульфата и других серосодержащих компонентов в наибольшей степени прослеживается на высоте 4.2 км над районами, прилегающими к озеру Байкал, а также располагающимися на Камчатке, северо-востоке и северо-западе Американского континента. И это вопреки снижению уровня ионизации при движении от полюса к экватору [Yu, 2010] и относительно высокие по меркам зимы температуры, что указывает на преимущественно антропогенное происхождение загрязнения атмосферы выбросами диоксида серы и других компонентов в перечисленных районах. Влияние температуры на динамику ионной нуклеации отчетливо проявляет себя на высоте 10.4 км, т.е. в условиях самых низких температур. Из данных расчета, см. рис. 3, следует, что на этой высоте генерация зародышей частиц с участием ионов занимает, практически всю атмосферу. При этом их образование в очагах характеризует слабо выраженные различия J_{ion} .

Подытоживая вышесказанное можно утверждать, что в тропосфере и особенно в нижней ее части, т.е. в условиях относительно высоких температур в зимнее время решающим фактором в динамике формирования зародышей частиц в нуклеации является, по-видимому, влияние заря-

да комплексного ионов на термическую стабильность кластеров. В тоже время в верхней тропосфере, т.е. в условиях низких температур, решающим оказывается влияние заряда ионов на стабильность кластеров из-за дефицита влажности воздуха. Так, несмотря на интенсивную ионизацию воздуха в высоких широтах в Северном полушарии наблюдается заметный спад J_{ion} , по мере подъема над подстилающей поверхностью, что связано с резким снижением концентрации паров воды в атмосфере до $\approx 10^7 \text{ см}^{-3}$. В Северном полушарии это приводит к тому, что на высоте 10.4 км, например, величина $J_{\text{ion}} \approx 2 \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$. В тоже время содержание паров воды в зимнее время в Южном полушарии на полтора порядка выше, что приводит к гораздо более высоким значениям J_{ion} .

На рис. 4–6 показан вид рассчитанных в работе распределений счетных концентраций аэрозольных частиц различных размеров (от 3.5 до $\approx 60 \text{ нм}$) спустя 18 часов после инициализации модели на высоте 4.2 км. Наряду с образованием здесь частиц аэрозоля над Байкальским регионом просматриваются также обширные области их формирования над Севером РФ (Баренцево и Карское моря), над Норвежским морем и над Скандинавией, а также над регионами, охватывающими северо-восток и северо-запад Американского континента. Образование аэрозольных частиц в этих регионах, начинающееся на высотах $\approx 2 \text{ км}$, см. также [Yu et al., 2010] отчетливо просматривается и на высоте 4.2 км. При этом образование частиц в Байкальском регионе вызвано высокой антропогенной нагрузкой и, как результат, высокими концентрациями паров серной кислоты ($\geq 5 \times 10^7 \text{ см}^{-3}$). Благоприятствуют ионной нуклеации и достаточно низкие температуры и достаточно высокий уровень относительной влажности воздуха (0.6–0.7), что в совокупности приводит к уровню пороговых концентраций паров серной кислоты на порядок более низких, чем их содержание над данным регионом. С подобной ситуацией встречаемся, рассматривая результаты расчетов над северо-востоком и северо-западом Американского континента. В то же время возникновение частиц на этой высоте, прослеживаемое над Якутией, Камчаткой и Сахалином, а также над акваториями Чукотского, Берингово и Охотского морей, наблюдается в условиях низкой инсоляции и невысокого содержания серосодержащих примесей в атмосфере. Формирование частиц в этих областях обязано в основном транспорту оксидов серы и сопровождающих его процессов окисления и последующей нуклеацией, что вызывается в зимнее время низкими температурами (220–245 K) и высокой относительной влажностью воздуха (≥ 0.65).

Наблюдаемый в расчетах прирост концентрации присутствующей в наибольшей концентрации частиц первой моды вызван генерацией в

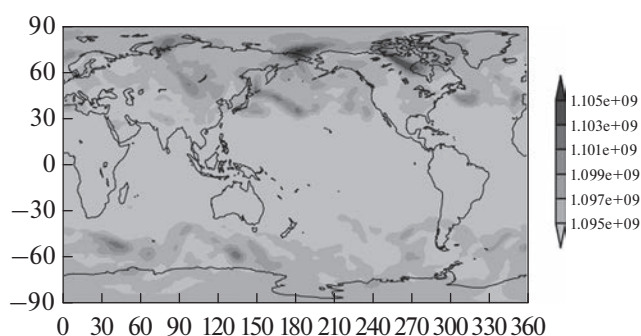


Рис. 4. Глобальное распределение счетных концентраций частиц вторичного аэрозоля размером 3.5 нм спустя 18 ч после инициализации модели. Высота над подстилающей поверхностью 4.2 км, зимнее время (январь 2002 г.).

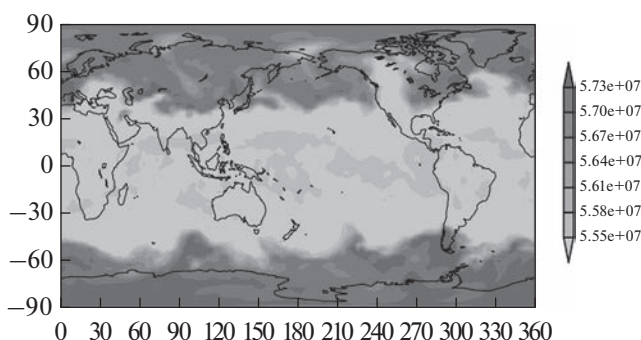


Рис. 5. Глобальное распределение счетных концентраций частиц вторичного аэрозоля размером 25.8 нм спустя 18 ч после инициализации модели. Высота над подстилающей поверхностью 4.2 км, зимнее время (январь 2002 г.).

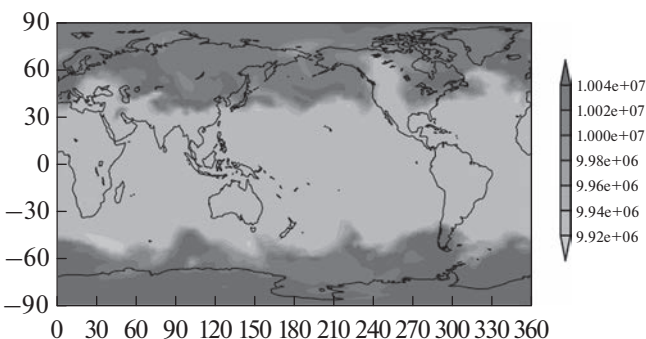


Рис. 6. Глобальное распределение счетных концентраций частиц вторичного аэрозоля размером 60.7 нм спустя 18 ч после инициализации модели. Высота над подстилающей поверхностью 4.2 км, зимнее время (январь 2002 г.).

процессах нуклеации паров воды и серной кислоты мельчайших новых частиц и их захватом ядрами конденсации. Этот захват новых частиц сопровождается ростом размеров ядер конденсации. Одновременно с этими ядрами конденсации захватываются из воздуха молекулы серной кислоты и воды, что также ведет к росту размеров частиц первой моды. Результативно оба эти процесса, а также участие частиц первой моды в коагуляционных процессах, ведет к переходу частиц из первой моды (3.5 нм) во вторую (25.8 нм) и последующие (третью моды 60.7 нм) моды частиц [Kurihara and Televa, 1974]. На рис. 5–6 наблюдается также прирост концентраций частиц с первой по третью моду над Арктикой, что связано с участием ионов в процессе образования частиц.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведены результаты расчетов распределения счетной концентрации вторичного сульфатного аэрозоля в зимнее время. Расчеты выполнялись для сферической атмосферы с применением физически полной модели глобального переноса многокомпонентных газовых примесей и аэрозолей в региональном масштабе и сопутствующих физико-химических процессах. Наряду с бинарной нуклеацией паров воды и серной кислоты в расчетах принималась во внимание и их нуклеация с участием атмосферных ионов. Найдено, что ключевыми факторами, определяющими влияние ионов на пространственное распределение аэрозольных частиц в атмосфере, являются уровень ионизации, а также температура, относительная влажность и содержание в воздухе паров воды и серной кислоты. Показано, что влияние атмосферных ионов на распределение аэрозольных частиц прослеживается в нижней тропосфере. Так, на высоте 4.2 км образование зародышей частиц с участием ионов осуществляется лишь над районами, располагающимися над озером Байкал, районами Камчатки, а также над регионами, занимающими северо-восток и северо-запад Американского континента. В пределах областей локализации этого процесса в атмосфере скорость генерации в них зародышей меняется более чем на порядок величины.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований 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

- Алоян А.Е. Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: Наука, 2008. 415 с.
- 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.
- 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.
- Akimoto H. Atmospheric Reaction Chemistry, Springer, 2016.
- Aloyan A.E. Mathematical modeling of the interaction of gas species and aerosols in atmospheric dispersive systems // Russ. J. Num. Anal. Math. Model. 2000. V. 15(1–4). P. 211–224.
- Aloyan A.E., Yermakov A.N., Arutyunyan V.O. Modeling the influence of ions on the dynamics of formation of atmospheric aerosol // Izv. Atmos. Ocean Phys. 2021. V. 57. № 1. P. 104–109.
- Ferguson E.E. Ion–molecule reactions in the atmosphere // Kinetics of Ion–Molecule Reactions, Ed. by P. Ausloos, Springer, Boston, 1979. P. 377–403.
- Froyd K.D., Lovejoy E.R. Experimental thermodynamics of cluster ions composed of H₂SO₄ and H₂O. 1. Positive ions // J. Phys. Chem. A 2003. V. 107. № 45. P. 9800–9811.
- 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.
- Kirkby J., Curtius J., Almeida J. et al. Role of sulphuric acid ammonia and Galactic cosmic rays in atmospheric aerosol nucleation // Nature. 2011. V. 476. P. 429–433.
- Kurihara Y., Televa R.E. Structure of tropical cyclone developed in three-dimensional numerical simulation model // J. Atmos. Sci. 1974. V. 31. № 5. P. 893–919.
- Kusaka I., Wang Z.-G., Seinfeld J.H. Ion-induced nucleation: A density functional approach // J. Chem. Phys. 1995. V. 102. № 2. P. 913–924.
- Lowe D., MacKenzie R. Review of polar stratospheric cloud microphysics and chemistry // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2008. V. 70. № 1. P. 13–40.
- Yu F. Ion-mediated nucleation in the atmosphere: Key controlling parameters, implications, and look-up table // J. Geophys. Res. 2010. V. 115. D03206.
- Yu F., Luo G., Bates T.S. et al. Spatial distributions of particle number concentrations in the global troposphere: Simulations, observations, and implications for nucleation mechanisms // J. Geophys. Res. 2010. V. 115. D17205.
- Zuend A. and Seinfeld J.H. Modeling the gas-particle partitioning of secondary organic aerosol: the importance of liquid-liquid phase separation // Atmos. Chem. Phys. 2012. V. 12. № 9. P. 3857–3882.

On the Influence of Atmospheric Ions on Aerosol Formation: Numerical Modeling

A. E. Aloyan^{1, *}, A. N. Yermakov^{2, **}, and V. O. Arutyunyan¹

¹*Marchuk Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, ul. Gubkina, 8, Moscow, 119333 Russia*

²*Institute of Energy Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
Leninskii pr., 38, bild. 2, Moscow, 119334 Russia*

**e-mail: ezmakr2010@yandex.ru*

***e-mail: polclouds@yandex.ru*

A new mathematical model of the global transport of multicomponent gas impurities and aerosols has been constructed, including the formation of sulfate aerosols in the atmosphere in both hemispheres. Calculations of the nucleation rates and particle number concentrations were performed for the winter period in the troposphere using a unified model that takes into account chemical and kinetic transformation processes (photochemistry, nucleation, condensation/evaporation, and coagulation). Binary nucleation of sulfuric acid and water vapor was coupled with new-particle formation due to atmospheric ions. The numerical results indicate a significant role of ion nucleation in aerosol formation in the Northern and Southern hemispheres in winter. The factors controlling the dynamics of ionic processes in the atmosphere and their influence on the spatio-temporal distribution of aerosol particles involve not only the level of air ionization but also temperature, relative humidity, and the content of sulfur and water vapor in the air. At a height of 4.2 km, the formation of particle nuclei with the participation of ions occurs only over the Lake Baikal and Kamchatka regions as well as the regions of the northeast and northwest of the American continent. Within the regions of localization of this process in the atmosphere, the rate of new particle generation varies by more than an order of magnitude.

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