

УДК 551.510.41, 551.511.3

**ВЛИЯНИЕ ТРОПОСФЕРНОГО СУЛЬФАТНОГО АЭРОЗОЛЯ  
НА ФОРМИРОВАНИЕ ОБЛАЧНОСТИ НАД МОРЕМ<sup>1</sup>***Алоян А. Е.<sup>2</sup>, Ермаков А. Н.<sup>3</sup>, Арутюнян В. О.<sup>4</sup>*

TROPOSPHERIC SULFATE AEROSOL IMPACT ON CLOUDINESS FORMATION OVER THE SEA

Aloyan A. E., Ermakov A. N., Arutunyan V. O.

We have developed a combined model of moist convection, cloud formation, and sulfate aerosol dynamics in the troposphere and lower stratosphere over the sea with natural emissions of sulfur-containing compounds. The main sources of condensation nuclei in the troposphere include not only NaCl but also biogenic dimethylsulfide, the photochemical transformations of which lead to the formation of sulfate aerosols. Analysis of the results of numerical experiments indicates that sulfate aerosols have a considerable impact on cloud formation in the middle troposphere. In the scenario with no biogenic sulfate aerosol particles, the formation of clouds in the middle and upper troposphere over the sea becomes hindered.

Keywords: mathematical modeling, atmospheric aerosol, sulfate particles, cloud drops, microphysics, condensation nuclei, turbulence, convection, coagulation, condensation.

**Введение**

Сульфатный аэрозольный слой в атмосфере представляет собой высокодисперсную систему мельчайших капель водного раствора серной кислоты, располагающихся между высотами 15 и 30 км. Эти частицы размером от 0,1 до 1 мкм поглощают и рассеивают коротковолновое солнечное излучение, что ведет к отрицательному радиационному воздействию на климатическую систему. Многочисленные натурные измерения свидетельствуют о том, что эти частицы формируются не только в стратосфере, но и в средней и верхней тропосфере. Поэтому необходимо более тщательно исследовать процессы формирования частиц сульфатных аэрозолей в тропосфере и нижней стратосфере, возникающих в процессе гомогенной бинарной нуклеации (например, паров воды и серной кислоты), и проследить за их участием в формировании облачности в первую очередь над поверхностью морей и океанов. Частицы нук-

леационной моды, имеющие первоначально нанометровый размер, могут затем расти как за счет конденсации низколетучих паров, так и за счет внутримодовой коагуляции.

Для того чтобы понять природу и кинетические закономерности возникновения и поведения взвешенных в атмосфере сульфатных частиц, следует принять во внимание вклады в их образование различных первичных источников серосодержащих веществ, учесть процессы переноса, диффузии и выведения частиц из атмосферы, а также изменения их микрофизических и химических свойств. Эти свойства частиц аэрозоля определяются процессами нуклеации, конденсации/испарения, коагуляции и фотохимической трансформации с участием газообразных серосодержащих веществ. Изменчивость динамики этих процессов влечет за собой изменению дисперсного состава аэрозолей в тропосфере и стратосфере. Химический состав частиц при этом существенно изменяется в зависимости от размера, что имеет прин-

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ (12-05-00278, 12-05-00236).

<sup>2</sup>Алоян Арташ Еремович, д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Института вычислительной математики ИВМ РАН; e-mail: aloyan@inm.ras.ru.

<sup>3</sup>Ермаков Александр Николаевич, д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Института энергетических проблем химической физики РАН; e-mail: ausermakov@chph.ras.ru.

<sup>4</sup>Арутюнян Вардан Оганесович, канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник Института вычислительной математики РАН; e-mail: vardan@inm.ras.ru.

ципиальное значение для физики аэрозолей и химии атмосферы. Поскольку равновесие в дисперсной системе устанавливается достаточно медленно по отношению к временному масштабу протекания других процессов, в расчетах динамики формирования аэрозоля в атмосфере необходимо использовать неравновесную функцию распределения частиц по размерам. В атмосфере над сушей основным источником образования паров серной кислоты — предшественника сульфатного аэрозоля являются естественные и антропогенные выбросы диоксида серы. Для атмосферы над морями и океанами их источником является эмиссия диметилсульфида (ДМС) и др. Таким образом, наряду с выбрасываемыми мельчайшими частицами NaCl, ядрами конденсации, способствующими образованию облачности над морем, могут служить и формирующиеся в тропосфере сульфатные аэрозоли.

Большинство моделей влажной конвекции предсказывает возникновение облачности над морем на высотах 500–1200 м. В действительности же они могут формироваться и в средней тропосфере, т.е. на существенно больших высотах. Причина разногласия заключается в том, что содержание атмосферных ядер конденсации, включающих NaCl, над водной поверхностью, начиная с высоты 500 м, экспоненциально убывают, затрудняя тем самым процесс образования облака. Это диктует необходимость разработки новых механизмов формирования ядер конденсации над морской поверхностью. Одним из них является эмиссия морями и океанами ДМС. Проникая в тропосферу, ДМС подвергается фотохимической трансформации в пары серной кислоты, накопление которой в тропосфере приводит к развитию процесса гомогенной бинарной нуклеации. В результате этого в атмосфере формируются первичные мельчайшие аэрозольные частицы, растущие со временем в процессах конденсационного роста и их коагуляции. Возникающие при этом более крупные частицы выступают в роли ядер конденсации, способствуя процессу образования облака.

## 1. Постановка задачи

Итак, для оценки возможности участия тропосферного сульфатного аэрозоля в формировании облачности над морем необходимо решать последовательно следующие

две задачи. Первая задача — моделирование формирования сульфатных аэрозольных частиц в тропосфере и стратосфере над морем при заданных значениях эмиссии ДМС. Попадая на высоты 3 км и выше, ДМС путем фотохимических реакций приводит к образованию паров серной кислоты. Далее появление серной кислоты в условиях уменьшающейся с высотой температуры активизирует процессы бинарной нуклеации, что приводит к формированию мельчайших сульфатных частиц. Эти частицы со временем растут в результате кинетических процессов конденсации и коагуляции, в итоге оказываясь ядрами конденсации.

Для решения поставленной задачи использовалась математическая модель, включающая уравнения глобального переноса газовых примесей и аэрозолей в атмосфере, нелинейные дифференциальные уравнения фотохимической трансформации веществ, процессов гомогенной бинарной нуклеации (образования новых частиц из газопредшественников), квазилинейные кинетические уравнения конденсации/испарения и нелинейные интегро-дифференциальные уравнения коагуляции. Основные физико-химические и кинетические механизмы, ответственные за формирование сульфатных аэрозолей как ядер конденсации, изложены ранее в работах [1–3].

Вторая задача — моделирование влажной конвекции и формирование облачности над морем с использованием атмосферных ядер конденсации, включающих как NaCl (до высоты ~1,5 км), так и сульфатные частицы (начиная с высоты выше 3 км). Эта задача в сравнении с предшествующей [3] решается на более мелкой сетке. Таким образом, рассматриваются две задачи, имеющие различные пространственно-временные масштабы в глобальном и региональном масштабах.

## 2. Численная модель формирования сульфатных аэрозольных частиц в атмосфере

Рассмотрим численную модель глобального переноса многокомпонентных малых газовых примесей и аэрозолей и процесса образования сульфатных аэрозолей в атмосфере. Модель рассматривается применительно к Земле, имеющей сферическую форму, в системе координат  $(\lambda, \psi, z)$ , где  $\lambda$  — долгота,  $\psi$  — дополнение до широты,  $z$  — высота.

Основные уравнения изменения концентраций газовых примесей и аэрозолей во времени запишем в следующем виде [1–3]

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{u}{a \sin \psi} \frac{\partial C_i}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial C_i}{\partial \psi} + w \frac{\partial C_i}{\partial z} = \\ = F_{\text{gas}} - P_{\text{nucl}} - P_{\text{cond}} + P_{\text{phot}} + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{1}{a^2 \sin^2 \psi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \frac{\partial C_i}{\partial \lambda} + \\ + \frac{1}{a^2 \sin \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \mu \sin \psi \frac{\partial C_i}{\partial \psi}, \quad (2.1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + \frac{u}{a \sin \psi} \frac{\partial \varphi_k}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial \varphi_k}{\partial \psi} + (w - w_g) \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} = \\ = F_{\text{aer}} + P_{\text{cond}} + P_{\text{coag}} + P_{\text{nucl}} + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} + \frac{1}{a^2 \sin^2 \psi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \frac{\partial \varphi_k}{\partial \lambda} + \\ + \frac{1}{a^2 \sin \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \mu \sin \psi \frac{\partial \varphi_k}{\partial \psi}. \quad (2.2) \end{aligned}$$

Здесь  $C_i (i = \overline{1, N_g})$ ,  $\varphi_k (k = \overline{1, N_a})$  — концентрации газовых примесей и аэрозолей;  $N_g$  и  $N_a$  — число газовых компонент и аэрозольных фракций, соответственно;  $(u, v, w)$  — компоненты вектора скорости ветра в направлениях  $\lambda, \psi, z$ , соответственно;  $w_g$  — скорость гравитационного оседания;  $a$  — средний радиус Земли;  $\mu$  и  $\nu$  — коэффициенты турбулентного обмена в горизонтальном и вертикальном направлениях, соответственно;  $F_{\text{gas}}$  и  $F_{\text{aer}}$  описывает источники газовых примесей и аэрозолей;  $P_{\text{nucl}}$ ,  $P_{\text{cond}}$ ,  $P_{\text{coag}}$  и  $P_{\text{phot}}$  — операторы нуклеации, конденсации, коагуляции и фотохимической трансформации, соответственно.

Уравнения (2.1) и (2.2) рассматриваются в области  $D_t = Gx[0, T]$ , 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  $\psi$ .

Для задания краевого условия в приземном слое используется уравнение сопротивления вхождению примеси поверхностью земли, в виде совокупности трех членов: аэродинамического сопротивления  $r_a$ , квазиламинарного сопротивления пограничного слоя  $r_b$ , обусловленного процессами молекулярной диффузии вблизи поверхности земли, и поверхностного сопротивления  $r_c$ , связанного с процессами на поверхности осадения.

Более полная постановка задачи формирования сульфатных частиц в тропосфере и нижней стратосфере и численные алгоритмы их решения детально изложены в [3]. С использованием описанной выше модели были проведены численные эксперименты по воспроизведению процесса формирования сульфатных частиц в тропосфере и нижней стратосфере, обусловленного заданными значениями эмиссий с поверхности земного шара антропогенных ( $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_x$ ,  $\text{CH}_4$ ) и биогенных ( $\text{H}_2\text{S}$  (сероводород),  $\text{COS}$  (карбонил сульфид),  $\text{CS}_2$  (дисульфид углерода), ДМС (диметилсульфид)) компонентов. При этом значения эмиссий ДМС задавались на поверхности Тихого, Атлантического и Индийского океанов для зимнего и летнего периодов. Для этих периодов времени задавались и наземные источники эмиссии сероводорода, карбонилсульфида и дисульфида углерода.

Расчеты проводились при следующих значениях входных параметров: число узлов сеточной области по долготе —  $144 \times 73$  с шагом  $2,5^\circ \times 2,5^\circ$ , число уровней по вертикали — 20, координатные поверхности в метрах: 100, 750, 1500, 2200, 3000, 4200, 5600, 7200, 9200, 10400, 11800, 14000, 18000, 22000, 26000, 30000, 34000, 38000, 42000, 46000. Шаг по времени — 30 мин., а в моделях конденсации и коагуляции — 5 мин. Метеорологическая информация заимствовалась из базы данных Европейского центра по среднесрочным прогнозам (ECMWF) для расчетов в продолжении января и июля 2002 г.

В цепочках химических реакций участвуют 52 газовых вещества, включающих азотно-сернистый и углеродный циклы, а также вещества биогенного происхождения. Общее количество реакций — 146, число реакций фотодиссоциации — 16. Использованы 25 дискретных интервалов по размерам аэрозольных частиц от 3 нм до 1,2 мкм. В деталях результаты численных экспериментов приведены в [3]. Ниже по этой причине приводим лишь рисунки, демонстрирующие формирование сульфатных частиц в тропосфере и нижней стратосфере.

На рис. 1 представлены данные о полях счетной концентрации сформировавшихся в атмосфере через 30 дней сульфатных частиц ( $\text{м}^{-3}$ ) с радиусами 5 нм (а) и 100 нм (б), в плоскости  $(x, y)$  на высоте  $z = 5600$  м. На рис. 2 представлены аналогичные данные для высоты  $z = 11800$  м. Из рис. 1–2 видно,

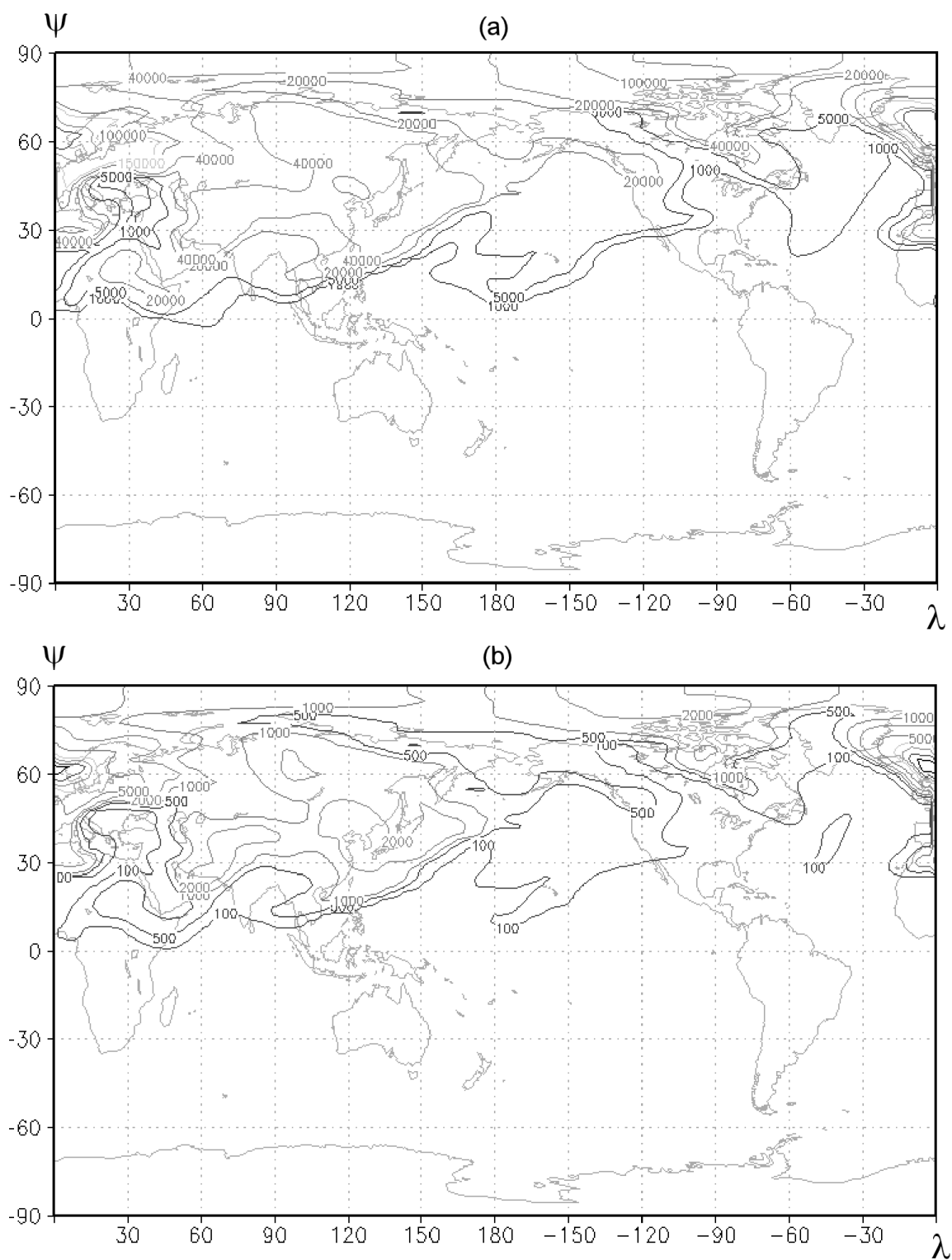


Рис. 1

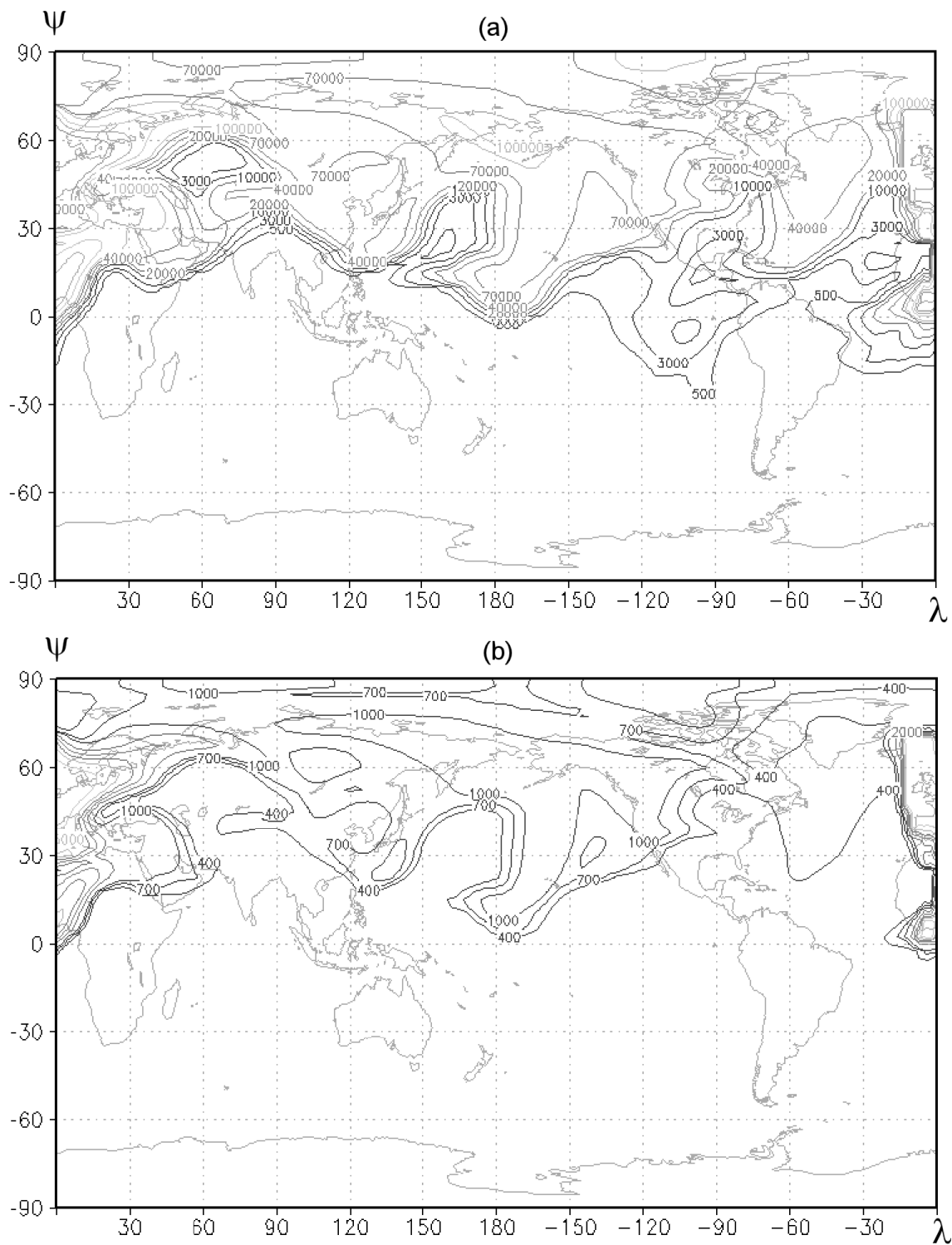


Рис. 2

что сульфатные частицы над морем интенсивно формируются как в средней тропосфере, так и в нижней стратосфере.

В тех областях, где над морем формируются сульфатные аэрозоли (в виде ядер конденсации), на более мелкой сетке решается задача влажной конвекции и формирования облачности. Таким образом, сульфатные аэрозоли, образующиеся в тропосфере, оказываются включенными в модель формирования облачности с учетом спектра размеров частиц.

### 3. Численная модель влажной конвекции и формирования облачности над морем

Рассмотрим трехмерную численную модель гидротермодинамики влажной конвекции и формирования облачности в тропосфере с учетом микрофизических процессов. Основные уравнения запишем в дивергентной (потокковой) форме [9]. Представим термодинамические величины в виде суммы двух слагаемых:  $\varphi = \bar{\varphi}(z) + \varphi'(x, y, z, t)$ ,  $\varphi = \rho, \vartheta, q_v, P$ , где  $\rho$  — плотность,  $\vartheta$  — потенциальная температура,  $q_v$  — удельная влажность,  $P$  — давление.

Тогда уравнения движения для влажной конвекции можно представить в индексных обозначениях

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}u_i) + \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}u_j u_i) = & -\frac{\partial P'}{\partial x_i} - 2\varepsilon_{ijk}\bar{\rho}\Omega_j u_k + \\ & + \delta_{iz}\bar{\rho}g \left( \frac{\vartheta'}{\bar{\vartheta}} + \varepsilon q'_v - Q_w - \frac{P'}{kP} \right) + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Здесь  $\varepsilon_{ijk}$  — абсолютно антисимметричный тензор,  $\delta$  — функция Кронекера,  $\Omega$  — угловая скорость вращения Земли,  $g$  — ускорение свободного падения,  $k = C_p/C_v$  — показатель адиабаты,  $\varepsilon = 0,608 = R_v/R_d$ , где  $R_v$  и  $R_d$  — газовые постоянные для сухого воздуха и водяного пара соответственно,  $Q_w$  — отношение смеси жидкой воды,  $\tau_{ij}$  — тензор вязких напряжений Рейнольдса. Следуя работе [4], симметричный тензор напряжений  $\tau_{ij}$  выразим через тензор деформации  $D_{ij}$  среднего движения  $\tau_{ij} = \bar{\rho}K_M D_{ij}$ , где

$$D_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial x_k},$$

$K_M = K_0 \Delta^2 |Def|$  — коэффициент турбулентной кинематической вязкости.

$\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$ , и  $K_0$  — константа. Деформация  $Def$  выражается через квадрат тензора деформаций

$$\begin{aligned} (Def)^2 &= \frac{1}{2} Sp D^2 = \\ &= (D_{11}^2 + D_{22}^2 + D_{33}^2) + D_{12}^2 + D_{13}^2 + D_{23}^2. \end{aligned}$$

Уравнение неразрывности имеет вид

$$\frac{\partial \bar{\rho}u_i}{\partial x_j} = 0. \quad (3.2)$$

Законы сохранения энергии и массы водяного пара задаются в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\vartheta) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}u_j \vartheta) = \\ = \frac{L\vartheta}{c_p T} \Phi + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( g K_H \frac{\partial \vartheta}{\partial x_j} \right), \\ \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}q_v) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}u_j q_v) = \\ = -\Phi + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( g K_H \frac{\partial q_v}{\partial x_j} \right), \end{aligned} \quad (3.3)$$

где  $\Phi$  — масса водяного пара, сконденсировавшегося в единичном объеме за единицу времени,  $T$  — абсолютная температура,  $L$  — удельная теплота конденсации. Отрицательные значения  $\Phi$  означают, что в данной точке в данный момент времени испарение преобладает над конденсацией.

#### 3.1. Уравнения микрофизики

Для учета микрофизических процессов в облачной системе используются две функции распределения  $n_1(x_i, r_n, t)$  для облачных ядер конденсации и  $n_2(x_i, m, t)$  для облачных капель, так что  $n_1(x_i, r_n, t) dr_n$  дает в точке  $x_i$  в момент времени  $t$  концентрацию ядер конденсации радиусом от  $r_n$  до  $r_n + dr_n$ , а  $n_2(x_i, m, t) dm$  — концентрацию облачных капель массой от  $m$  до  $m + dm$ . Зная  $n_2(x_i, m, t)$ , можно определить удельную водность для жидкой воды в каждой точке пространства

$$q_L = \frac{1}{\rho_0(z)} \int_{m_0}^{\infty} m n_2(x_i, m, t) dm.$$

Уравнение для облачных ядер конденсации можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j n_1) = \\ = - \left[ \frac{\partial n_1}{\partial t} \right]_{\text{nucl}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( K_H \frac{\partial n_1}{\partial x_j} \right), \end{aligned} \quad (3.4)$$

где слагаемое

$$\left[ \frac{\partial n_1}{\partial t} \right]_{\text{nucl}}$$

описывает уменьшение концентрации ядер конденсации из-за их активации при достижении пересыщения критического значения.

Уравнение для функции распределения капель описывает адвективный и турбулентный перенос, а также локальное изменение их концентрации под действием седиментации, конденсации/испарения, распада и коагуляции

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((u_j - w_g(m)\delta_{i3})n_2) = \\ = \left[ \frac{\partial n_2}{\partial t} \right]_{\text{nucl}} + \left[ \frac{\partial n_2}{\partial t} \right]_{\text{cond}} + \left[ \frac{\partial n_2}{\partial t} \right]_{\text{coag}} + \\ + \left[ \frac{\partial n_2}{\partial t} \right]_{\text{decay}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( K_H \frac{\partial n_2}{\partial x_j} \right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

где  $w_g(m)$  — скорость падения капли массы  $m$ .

Теперь рассмотрим локальные микрофизические процессы.

### 3.2. Нуклеация

Значение влажности воздуха, при котором облачная капля пребывает в равновесии с окружающим паром, отличается от насыщающей влажности над плоской поверхностью. Это обусловлено, во-первых, кривизной поверхности капли и связанным с этим поверхностным натяжением, а во-вторых, соленостью капли. Вклады этих эффектов противоположны по знаку, и равновесное для данной капли значение влажности определяется формулой Кёлера [5]

$$S = 1 + \frac{2\sigma}{\rho_w R_v T r} - \frac{2\rho_n M_w r_n^3}{\rho_w M_n r^3}. \quad (3.6)$$

Здесь  $S = q/q_s(T)$  — относительная влажность, выраженная в долях от насыщающего значения  $q_s(T)$ ,  $\rho_w$ ,  $\rho_n$ ,  $M_w$ ,  $M_n$  — плотность

и молекулярная масса воды и сухой соли соответственно,  $\sigma$  — поверхностное натяжение воды,  $r$  и  $r_n$  — радиусы облачной капли и ее солевого ядра соответственно. В численных экспериментах будем полагать, что ядра состоят из NaCl.

В естественных условиях растущие на небольших ядрах капли в формирующейся облачной системе приходят в равновесие с требуемым пересыщением достаточно быстро (за секунды), вырастая при этом до размеров, удовлетворяющих уравнению (3.6). При этом для каждого  $r_n$  существует критическое значение

$$r_c(r_n) = \sqrt{\frac{3M_w \rho_n r_n^3 R_v T}{M_n \sigma}}, \quad (3.7)$$

такое, что  $dS/dr|_{r=r_c} = 0$ . Как только относительная влажность превысит критическое значение

$$\begin{aligned} S_c(r_n) = S(r_c(r_n)) = \\ = 1 + \sqrt{\frac{16\sigma^3 M_n}{27\rho_w^2 (R_v T)^3 M_w \rho_n r_n^3}}, \end{aligned}$$

становится возможным конденсационный рост капель, радиус которых равен либо превышает  $r_c$ , вне зависимости от дальнейшего увеличения пересыщения. Таким образом, при  $S = S_c(r_n)$  ядра конденсации размера  $r_n$  активируются, порождая облачные капли начального радиуса  $r_0 = r_c(r_n)$ .

После активации процесса конденсации облачных ядер их дальнейший рост описывается уравнением роста капли [6]

$$\frac{dr}{dt} = \frac{D_v E_S F_V}{\rho_w R_v T} \frac{G_1}{(r + r^*)(1 + G_2)}, \quad (3.8)$$

где

$$G_1 = S - \frac{2\sigma}{\rho_w R_v T r} + \frac{2\rho_n M_w r_n^3}{\rho_w M_n r^3},$$

$$G_2 = \frac{D_v E_S L^2}{\kappa R_v^2 T^3},$$

$$\begin{aligned} r^* = \frac{D_v}{\alpha \sqrt{\frac{2\pi}{R_v T} \left( 1 + \frac{D_v E_S L^2}{\kappa R_v^2 T^3} \right)}}, \\ \alpha = 0,036. \end{aligned}$$

Здесь  $D_v$  — коэффициент диффузии,  $E_S$  — давление насыщения,  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности воздуха,  $r^*$  учитывает влияние газокинетических процессов на

коэффициент диффузии для мелких капель,  $\alpha$  — коэффициент конденсации. Коэффициент вентиляции  $F_V$  определяется следующей формулой [7]:

$$F_V = \begin{cases} 1,0 + 0,108 (Re^{1/2} Sc^{1/3})^2, & Re < 2,5, \\ 0,78 + 0,308 Re^{1/2} Sc^{1/3} & Re \geq 2,5, \end{cases}$$

где  $Sc$  — число Шмидта,  $Re$  — число Рейнольдса.

### 3.3. Конденсация и испарение водяных капель

Рост облачных капель в конвективных облаках определяется совместным влиянием различных факторов. Простые оценки показывают, что при сильных вертикальных движениях и больших пересыщениях удвоение размеров облачных капель происходит за время от 10 до 50 сек. Исключение составляют частицы, растущие на гигантских ядрах. Это означает, что даже на начальной стадии образования облака влияние присутствия в частицах соли дает дополнительный вклад в водность облака (1%) лишь в относительно тонком слое вблизи границы облака. Если принять за эту границу значение водности  $0,1 \text{ г/м}^3$ , то соотношение удельного содержания соли и воды ( $\text{г/м}^3$ ) не превысит при этом  $\sim 10^{-6} - 10^{-5}$ , что пренебрежимо мало по сравнению с тем, что обеспечивается пересыщением, обусловленным различием давления паров воды над каплями и на значительном удалении от них. Поэтому влияние присутствия растворенных веществ целесообразно учитывать лишь в течение небольшого промежутка времени сразу после активации ядер конденсации, а в дальнейшем им можно пренебречь. Численные эксперименты, проведенные в [6], показали, что распределение размеров облачных капель во многих случаях нечувствительно к химическому составу и доле растворенного вещества в аэрозольных частицах. Эти результаты подтверждают правомерность выбранного нами подхода. По этой же причине нет необходимости вводить двумерную функцию распределения облачных капель, где независимыми переменными служили бы масса капли и доля растворенной соли.

### 3.4. Коагуляция и дробление

Изменение спектра размеров облачных капель под действием коагуляции описыва-

ется хорошо известным уравнением Смолуховского

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial n_2(m)}{\partial t} \right]_{\text{coag}} &= \\ &= \frac{1}{2} \int_0^m \tilde{K}(m, m_1) n_2(m - m_1) n_2(m) dm_1 - \\ &- n_2(m) \int_0^\infty \tilde{K}(m, m_1) n_2(m_1) dm_1. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Здесь  $\tilde{K}(m, m_1)$  — коэффициент коагуляции, характеризующий вероятность слияния частиц с массами  $m$  и  $m_1$ . Коэффициенты коагуляции учитывают движения частиц, в диффузионном, свободномолекулярном и переходном режимах.

### 3.5. Область решения, начальные и граничные условия

Система уравнений (3.1)–(3.9) решается в области  $D_t = D \times [0, T]$ ,

$$D = \{ (x, y, z) : \\ x \in [-X, X], y \in [-Y, Y], z \in [0, H] \},$$

где  $H$  — верхняя граница области моделирования. Начальные и граничные условия задаются следующим образом:

$$u'_i = 0 \quad (i = \overline{1, 3}), \quad v' = 0, \quad q'_v = 0 \quad \text{при } t = 0;$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_j} = 0 \quad (i = \overline{1, 3}), \quad \frac{\partial \rho \vartheta}{\partial x_j} = 0, \quad \frac{\partial \rho q_v}{\partial x_j} = 0 \\ \text{при } x_j = \pm X_j \quad (j = 1, 2); \end{aligned}$$

$$u'_i = 0 \quad (i = \overline{1, 3}), \quad v' = 0, \quad q'_v = 0 \\ \text{при } z = H; \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u_i}{\partial z} = a_u \rho u_i \quad (i = 1, 2), \quad \frac{\partial \rho q_v}{\partial z} = a_\vartheta \rho (v - v_0), \\ \frac{\partial \rho \vartheta}{\partial z} = a_\vartheta \rho (q_v - q_{v0}) \quad \text{при } z = h; \end{aligned}$$

$$w = 0 \quad \text{при } z = 0.$$

Здесь  $h$  — высота приземного слоя атмосферы,  $a_u$  и  $a_v$  — параметры, определяемые из



модели приземного слоя,  $v_0$  и  $q_{v0}$  — соответственно значения потенциальной температуры и удельной влажности у поверхности Земли,  $h$  — высота приземного слоя.

Для концентрации облачных капель принимается начальное условие  $n_2 = 0$  при  $t = 0$ . Также полагается, что  $n_2 = 0$  на верхней и боковых границах и  $\frac{\partial n_2}{\partial z} = 0$  при  $z = h$ . Для ядер конденсации в качестве начального значения и условия на боковых границах принимается вертикальный профиль концентрации облачных ядер  $n_1 = n_o(z)$ , характерный для невозмущенной атмосферы.

Численный алгоритм решения задачи влажной конвекции и формирования облачности изложен в [8–10].

#### 4. Результаты численных экспериментов

С помощью вышеизложенной модели проводились численные эксперименты по моделированию влажной конвекции и формирования облачности в атмосфере. Расчеты проводились при следующих значениях входных параметров:  $X = 40$  км,  $Y = 40$  км,  $\Delta x = \Delta y = 1000$  м,  $\Delta z = 100$  м, если  $k = 1,30$ ,  $\Delta z = 125$  м, если  $k = 31,44$  и  $\Delta z = 150$  м, если  $k = 45,51$ ,  $\Delta t = 90$  с,  $T_1 = 298$  К, размер расчетной сетки —  $41 \times 41 \times 51$ . Подстилающая поверхность представляет собой зеркало моря. Предполагалось, что часть акватории моря размерами  $20 \text{ км} < X < 22 \text{ км}$  и  $20 \text{ км} < Y < 22 \text{ км}$  является нагретой. В начальный момент времени тепловые возмущения по высоте над этой зоной задаются в следующем виде  $T_0(1) = 2^\circ\text{C}$ , если  $z = 100$  м;  $T_0(2) = 1^\circ\text{C}$ , если  $z = 200$  м;  $T_0(3) = 0,5^\circ\text{C}$ , если  $z = 300$  м;  $T_0(4) = 0,25^\circ\text{C}$ , если  $z = 400$  м, где  $T_0(k)$ ,  $k = 1, 4$  — распределение фоновой температуры по вертикали,  $f_0(z)$  — относительная влажность в начальный момент. По мере развития конвекции усиливается передача тепла, влаги и количества движения от земли в атмосферу. Испаряющаяся с водной поверхности влага переносится в верхние слои атмосферы. С выделением скрытой теплоты в области насыщения возникает энергетический источник развития влажной конвекции, при этом стратификация атмосферы становится влажнонеустойчивой, поскольку дополнительно появившийся тепловой источник приводит к нагреву атмосферы в зоне конденсации, что способствует возникновению соб-

ственной динамики с восходящими потоками и переносу тепла и водяного пара в вышележащие слои.

Приведем результаты некоторых численных экспериментов, показывающие влияние сульфатных аэрозольных частиц (ядра конденсации) на формирование облачности в тропосфере над морем.

Здесь и далее на всех рисунках счетная концентрация облачных капель дана в логарифмическом масштабе ( $\text{м}^{-3}$ ).

*Вариант 1.* В модели учитывается присутствие в атмосфере ядер конденсации включающих лишь NaCl.

На рис. 3 представлены изолинии счетной концентрации облачных частиц с радиусом  $0,93$  мкм на плоскости  $(x, z)$  для моментов времени  $t = 90$  мин. (рис. 3а),  $120$  мин. (рис. 3б),  $150$  мин. (рис. 3с) и  $180$  мин. (рис. 3д). Из рисунков видно, что в данном численном эксперименте спустя  $240$  мин. облако достигает высот  $2\text{--}2,7$  км над морем, выше облака не формируются из-за отсутствия ядер конденсации. Для облачных капель радиусом  $2,09$  мкм результаты приведены на рис. 4. Аналогичной структурой характеризуется формирующаяся облачность и для облачных капель других размеров, хотя их конфигурация отличается из-за влияния процессов конденсации/испарения и коагуляции. Формирование облачности выше  $2$  км в данном случае обусловлено конвекцией из-за задаваемых в начальный момент времени тепловых возмущений.

*Вариант 2.* В модели облачности учитываются ядра конденсации, состоящие как из NaCl, так и сульфатных ядер конденсации. На рис. 5 и 6 приведены изолинии концентраций облачных капель радиусом  $0,93$  мкм (рис. 5) и  $2,09$  мкм (рис. 6) для различных моментов времени. Нетрудно видеть, что в этом случае формируются двухъярусные облака. Первый ярус расположен на высотах от  $1,5$  до  $2,8$  км, а второй — между высотами  $3,2$  км и  $5$  км. Таким образом, сульфатные аэрозольные частицы как ядра конденсации оказывают заметное влияние на формирование облачности в тропосфере над морем.

#### Заключение

Построена совместная модель влажной конвекции и образования облачности и сульфатных аэрозолей в тропосфере над морской поверхностью с учетом эмиссий биоген-

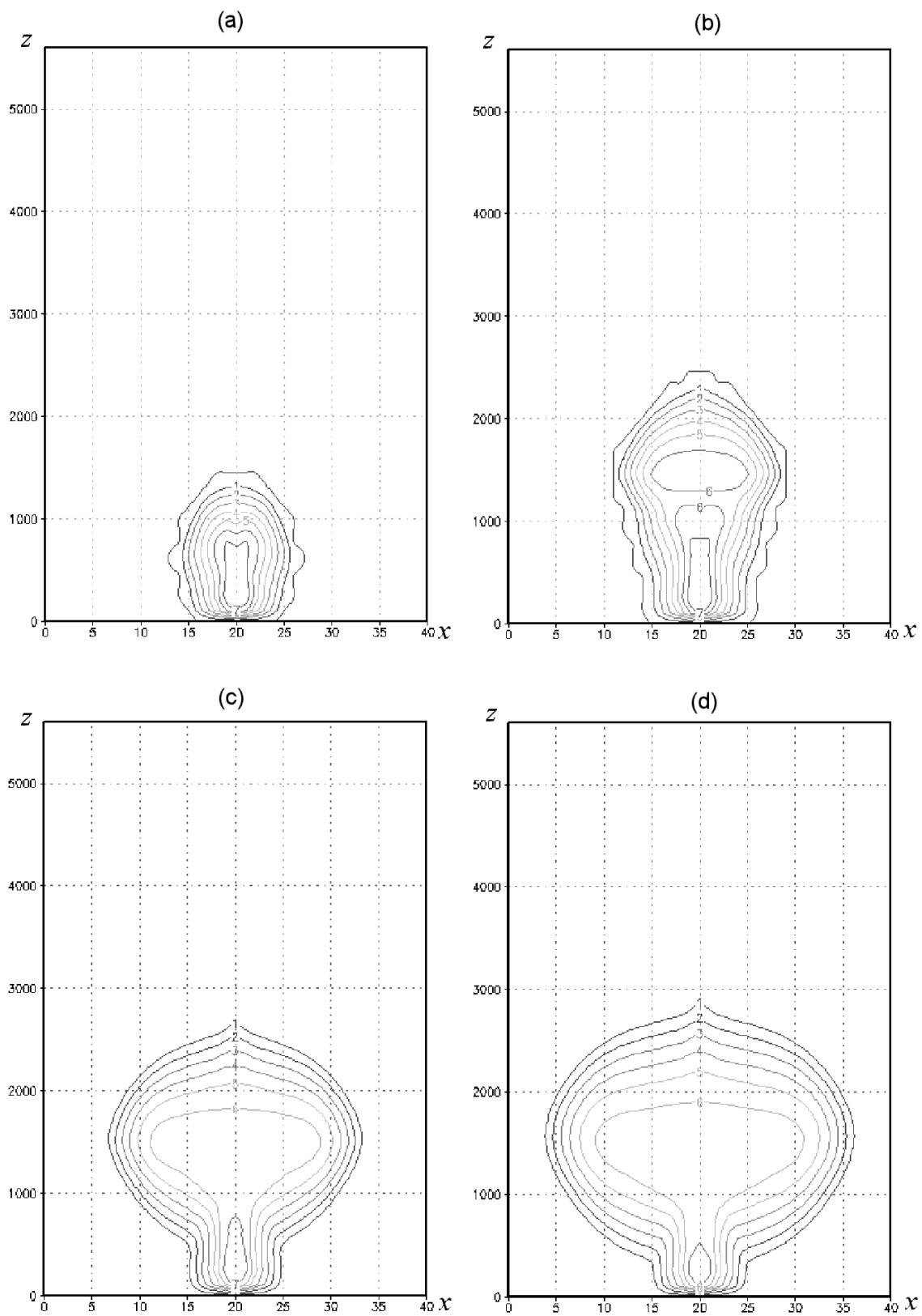


Рис. 3

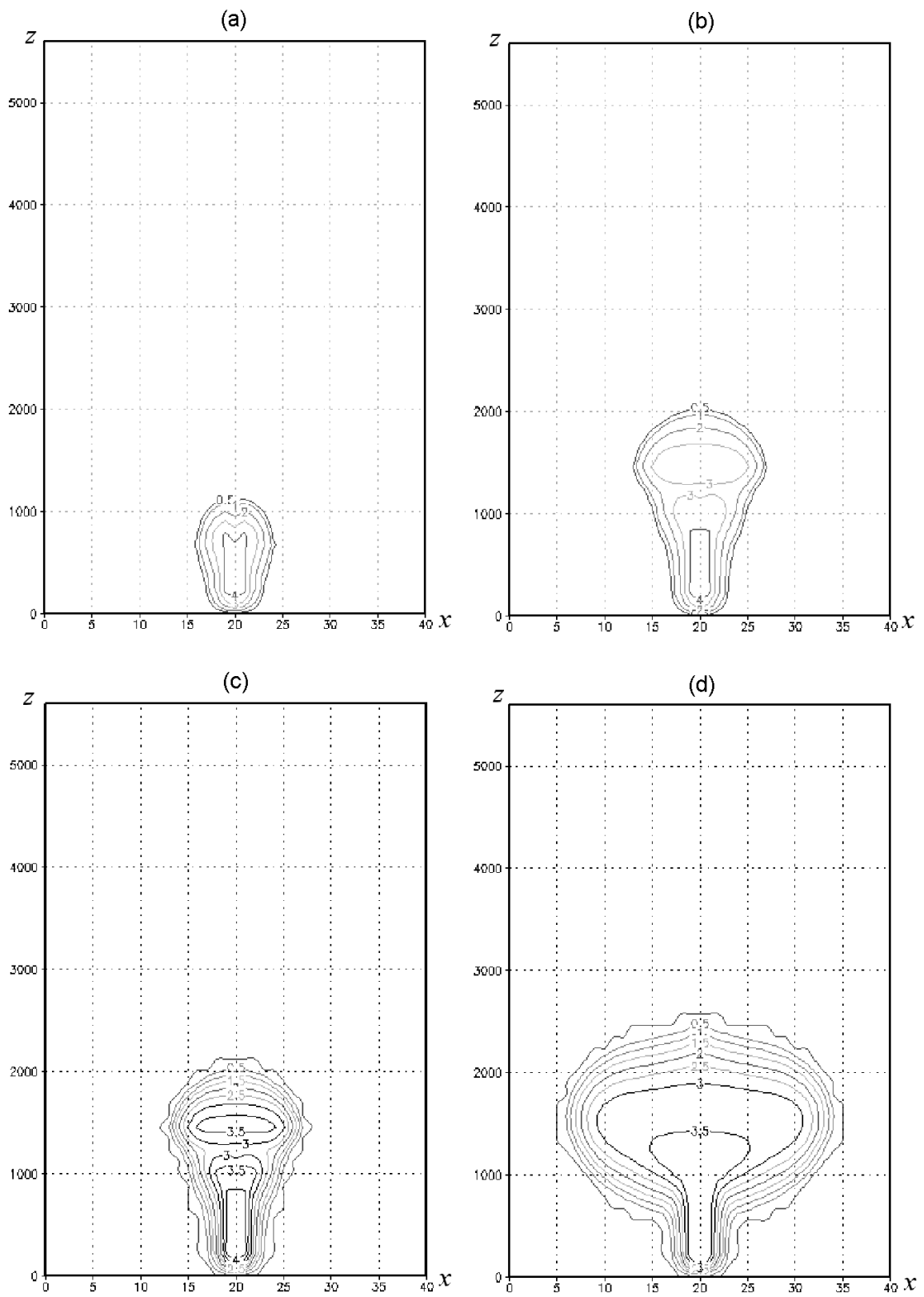


Рис. 4

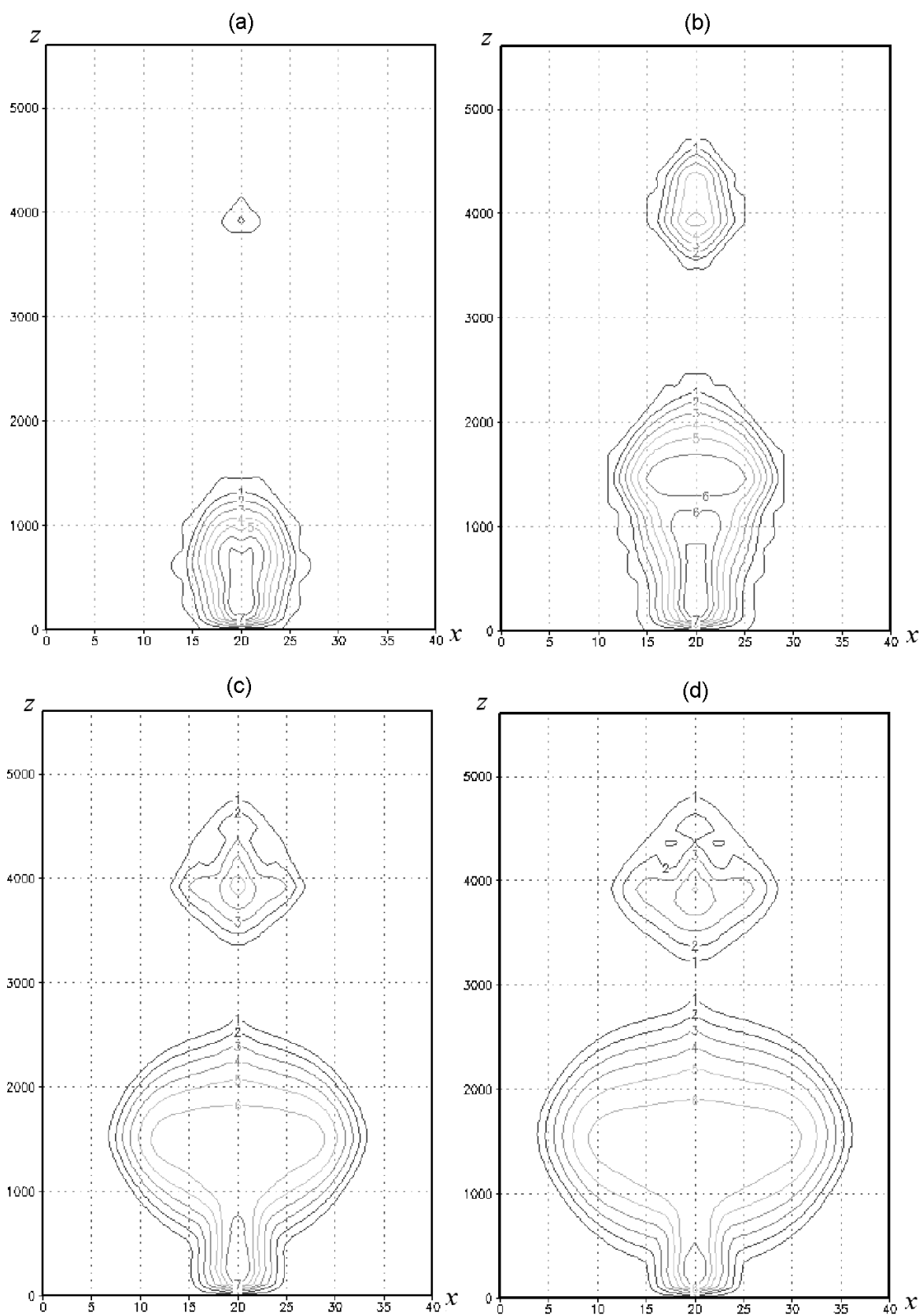


Рис. 5

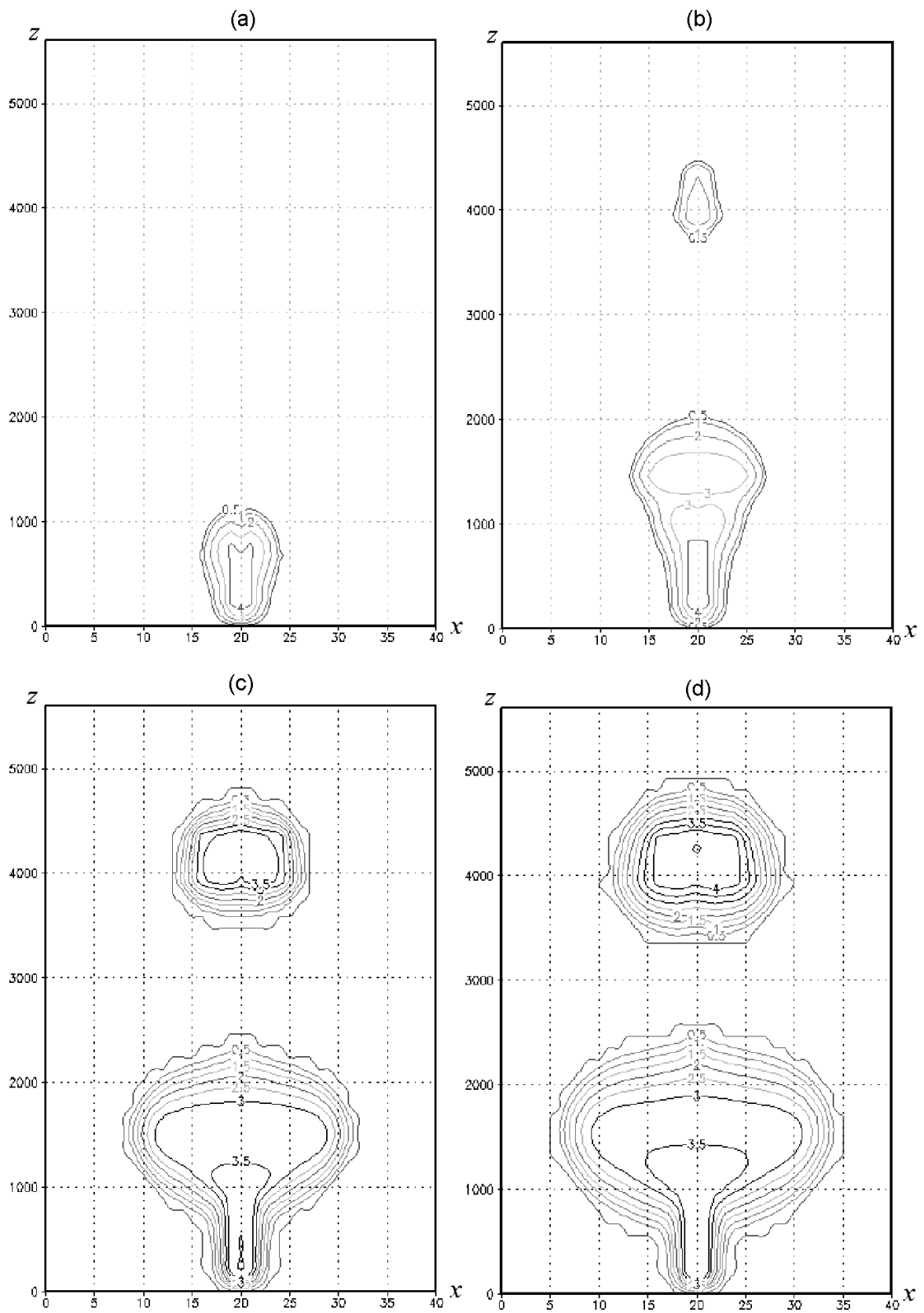


Рис. 6

ных компонентов. Модель капельного облака включает трехмерные уравнения облачной динамики и детальное описание микрофизических процессов на основе кинетических уравнений для ядер конденсации и облачных капель. Учитывается весь набор микрофизических процессов, ответственных за зарождение облачных капель на ядрах конденсации и их дальнейший рост до капель осадков (нуклеация, конденсация, испарение, коагуляция/дробление и седиментация). В большинстве моделей влажной конвекции предсказывается, что облака над морем образуются в основном на высотах 500–1200 м, а в реальности они могут формироваться и в средней тропосфере. Причина несоответствия заключается в том, что над водной поверхностью рассчитываемое в этих моделях содержание атмосферных ядер конденсации, начиная с высоты 500 м, экспоненциально убывает, затрудняя тем самым процесс образования облака. Поэтому нужен поиск новых механизмов, обеспечивающих образование ядер конденсации в тропосфере над морем. Показано, что одним из таких механизмов является эмиссия диметилсульфида, который вследствие фотохимической трансформации над морем становится источником образования паров серной кислоты, приводящих к развитию процесса гомогенной бинарной нуклеации. В результате этого в атмосфере формируются первичные мельчайшие аэрозольные частицы, которые со временем растут в процессах конденсации и коагуляции. Эти частицы выступают затем в роли ядер конденсации, способствуя процессу образования облака и на больших высотах над морской поверхностью. По разработанной модели были проведены численные эксперименты с учетом и без учета сульфатных частиц. Анализ численных экспериментов показал, что сульфатные частицы оказывают существенное влияние на процессы формирования облачности в средней тропосфере. В их отсутствие формирование облач-

ности в средней и верхней тропосфере над морем затруднено.

### Литература

1. *Aloyan A. E.* Mathematical modeling of the interaction of gas species and aerosols in atmospheric dispersive systems // *Russ. J. Num. Anal. Math. Model.* 2000. Vol. 15. No. 1–4. P. 211–224.
2. *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. Проблемы адаптации к изменению климата. М.: Росгидромет, 2012. С. 75–98.
3. *Алоян А. Е., Арутюнян В. О.* Моделирование динамики аэрозолей и формирования облачности при лесных пожарах // *Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества.* 2008. № 3. С. 1–15.
4. *Gal-Chen T., Somerville R. C. J.* On the use of a coordinate transformation for the solution of the Navier-Stokes equations // *J. Comput. Phys.* 1975. Vol. 17. P. 209–228.
5. *Pruppacher H. R., Klett, J. D.* Microphysics of clouds and precipitation. Dordrecht.: Reidel, 1978. 714 p.
6. *Kogan Y. L.* The simulation of a convective cloud in a 3-D model with explicit microphysics. Part I: Model description and sensitivity experiments // *J. Atmos. Sci.* 1991. Vol. 48. No. 9. P. 1160–1189.
7. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. Москва.: Наука, 1980. 456 с.
8. *Алоян А. Е.* Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. Москва.: Наука, 2008. 201 с.
9. *Алоян А. Е., Ермаков А. Н., Арутюнян В. О.* Моделирование конвективной облачности и ее влияние на газовый состав атмосферы // *Изв. РАН: Физика атмосферы и океана.* 2010. Т. 46. № 6. С. 1–15.
10. *Aloyan A. E.* Mathematical modeling of convective cloudiness with phase transitions // *Russ. J. Num. Anal. Math. Modeling.* 2010. No. 6. С. 1–12.

Ключевые слова: математическое моделирование, атмосферный аэрозоль, сульфатные частицы, облачные капли, микрофизика, ядра конденсации, турбулентность, конвекция, коагуляция, конденсация.

Статья поступила 4 октября 2013 г.

Институт вычислительной математики РАН, г. Москва

Институт энергетических проблем химической физики РАН, г. Москва

© Алоян А. Е., Ермаков А. Н., Арутюнян В. О., 2013