

SOLUÇÃO NUMÉRICA DO CRESCIMENTO DE PARTÍCULAS DE AEROSSOL POR CONDENSAÇÃO DE VAPOR

Relatório Científico Final do projeto na modalidade Iniciação Científica,
fomentado pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo.

Projeto FAPESP #2020/02368-9

Bolsista: Gabriel Ramos da Trindade

São Paulo, 9 de julho de 2021

Informações Gerais do Projeto

- Título do projeto:

Solução numérica do crescimento de partículas de aerossol por condensação de vapor

- Nome do Bolsista:

Gabriel Ramos da Trindade

Gabriel R. da Trindade

- Instituição sede do projeto:

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

- Nome do orientador:

Henrique M.J. Barbosa

Henrique M. J. Barbosa
Prof. Henrique M. J. Barbosa
Instituto de Física
Universidade de São Paulo

- Número do projeto de pesquisa:

2020/02368-9

- Período de vigência:

01/07/2020 a 30/06/2021

- Período coberto por este relatório científico:

10/12/2020 a 30/06/2021

Sumário

Informações Gerais do Projeto	i
1 Resumo do Projeto Proposto	1
2 Resumo do Relatório Parcial	1
3 Resumo do Relatório Final	2
4 Realizações do período	2
4.1 Crescimento de uma única gotícula	2
4.2 Crescimento de uma distribuição monodispersa	7
4.3 Introdução do modelo da parcela de nuvem	9
4.3.1 McFiggans et al. (2006)	11
5 Plano de Atividades	13
6 Pedido de Renovação	14
7 Reserva Técnica	14
Referências Bibliográficas	14

1 Resumo do Projeto Proposto

O principal objetivo deste projeto é ensinar ao aluno sobre higroscopicidade de aerossóis, ou seja, a deposição de vapor de água em uma partícula de aerossol e sua ativação como gota de nuvem. Os objetivos específicos para cada um dos períodos previstos no projeto são:

1. Escrever um modelo numérico simples para calcular a evolução temporal do diâmetro das partículas de aerossol em uma distribuição monodispersa exposta à diferentes valores de saturação constante (meses 1 a 10, quando seria pedido a renovação);
2. Estender o modelo para considerar a expansão adiabática da parcela e calcular o número de gotas ativadas na base de uma nuvem, considerando uma distribuição polidispersa de aerossóis e variando a concentração de partículas e a velocidade vertical (meses 11 a 21).

No primeiro período, o objetivo é dar ao aluno o entendimento físico sobre o processo fundamental de formação das nuvens: a deposição de vapor nas partículas de aerossol. O modelo será escrito em Python, a partir das equações da teoria κ -Köhler disponíveis nos livros-texto. O aluno fará simulações para diferentes níveis de saturação da atmosfera, e irá comparar o crescimento do diâmetro das partículas em função do tempo em cada caso. Por exemplo, acima e abaixo do máximo da curva de Köhler, ou para partículas de tamanhos diferentes.

No segundo período, o objetivo é estender o modelo adicionando as equações para calcular a expansão adiabática da parcela de ar, que iremos assumir está subindo a partir da superfície com velocidade constante. A equação de difusão de vapor será então integrada com condições de temperatura e saturação ambiental que variam no tempo, para cada um dos grupos de partículas com o mesmo tamanho (distribuição polidispersa). O aluno fará simulações variando a concentração de partículas e velocidade vertical.

2 Resumo do Relatório Parcial

No relatório anterior, descrevemos uma versão estendida da teoria de Köhler para a ativação de aerossóis como CCN (*Cloud Condensation Nuclei*) – o modelo κ -Köhler, que se dá por meio da introdução de um parâmetro de higroscopicidade κ . O parâmetro κ ,

conforme definido em [4], representa uma medida das características de captação de água por um aerossol, bem como sua atividade como CCN. A equação que define o modelo κ -Köhler é:

$$s(D_{wet}) = \frac{D_{wet}^3 - D^3}{D_{wet}^3 - D^3(1 - \kappa)} \exp\left(\frac{4\sigma_{s/a}M_w}{RT\rho_w D_{wet}}\right) \quad (1)$$

em que $s(D_{wet})$ é a taxa de saturação sobre uma gotícula de solução aquosa, D_{wet} é o diâmetro úmido da gotícula, D é diâmetro seco do material particulado, κ é o parâmetro de higroscopicidade, $\sigma_{s/a}$ é a tensão superficial da interface solução/ar, M_w é a massa molar da água, R é a constante universal dos gases, T é a temperatura e ρ_w é a densidade da água. A partir disso, fizemos um estudo sobre a ativação de aerossóis de diferentes higroscopicidades, buscando a validação do modelo por meio da reprodução de resultados encontrados em referências como [5], [6] e [8].

3 Resumo do Relatório Final

Apresentamos a teoria necessária para descrever o crescimento de uma única gotícula, bem como o de uma distribuição monodispersa, além dos resultados obtidos para várias simulações. Com isso, finalizamos as atividades propostas para o primeiro ano do projeto.

Das atividades propostas para o segundo período, é apresentado a extensão do que foi desenvolvido no primeiro período por meio da introdução do modelo da parcela de nuvem. Em seguida, comparamos os nossos resultados com os obtidos por McFiggans e co-autores (2006) [2].

Para o desenvolvimento do que será apresentado, foram estudados: o capítulo 13 do livro *Fundamentals of Atmospheric Modeling* (Mark Z. Jacobson, 2005), o capítulo 13 do livro *Microphysics of Clouds and Precipitation* (Pruppacher and Klett, 2010) e o capítulo 8 do livro *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change* (Sienfeld and Pandis, 2016).

4 Realizações do período

4.1 Crescimento de uma única gotícula

Vamos deduzir uma equação que governa o crescimento de uma única gotícula em repouso, em uma atmosfera estacionária cuja concentração de vapor de água está distribuída de

forma isotrópica. Após a condensação de uma certa quantidade de vapor água sobre o material particulado seco, temos a formação de uma gotícula de diâmetro D_{wet} . Caso esse diâmetro seja suficientemente grande ($D_{wet} > 1 \mu m$), a transferência de massa de água para a gotícula pode ser expressa pela equação de transferência de massa em regime contínuo [6]:

$$\frac{dm}{dt} = 2\pi D_{wet} D_v (c_{w,\infty} - c_{w,eq}) \quad (2)$$

em que m é a massa da gotícula, $c_{w,\infty}$ é a concentração do vapor no ambiente, $c_{w,eq}$ é a concentração de vapor de água de equilíbrio na superfície da gotícula e D_v é a difusividade do vapor de água no ar, dada em cm^2/s :

$$D_v = \frac{0,211}{P} \left(\frac{T}{273} \right)^{1,94} \quad (3)$$

em que T é a temperatura, em K, e p é a pressão, em atm. A concentração de equilíbrio $c_{w,eq}$ corresponde a concentração na superfície da gotícula e pode ser encontrada combinando a equação de Kelvin e a lei dos gases ideais, dependendo tanto do diâmetro D_{wet} quanto da temperatura T_a sobre a sua superfície. Entretanto, durante a condensação do vapor de água, calor é liberado sobre a superfície da gotícula, de modo que espera-se que a temperatura T_a sobre sua superfície seja maior do que a temperatura T_∞ do ambiente. Podemos encontrar a temperatura T_a por meio de um balanço energético adequado. Em um regime contínuo, a difusão de calor Q na gotícula é dada por

$$\frac{dQ}{dt} = 2\pi D_{wet} k_a (T_\infty - T_a) \quad (4)$$

em que a condutividade térmica, k_a , dada em $J/(m \cdot s \cdot K)$ é expressa por

$$k_a = 10^{-3} \cdot (4,39 - 0,071 \cdot T_a) \quad (5)$$

com T_a em K. Por sua vez, o calor latente liberado durante a condensação é dado por

$$dQ = -Ldm \quad (6)$$

de modo que substituindo-o na equação (4) e rearranjando os termos encontramos

$$-L \frac{dm}{dt} = 2\pi D_{wet} k_a (T_\infty - T_a) \quad (7)$$

que nos diz que, em condição de condição estacionária, o calor liberado pela condensação

da água é igual ao calor absorvido pelo ambiente. Encontramos a seguinte expressão para a temperatura T_a na superfície da gotícula:

$$T_a = T_\infty + \frac{L}{2\pi D_{wet} k_a} \frac{dm}{dt} \quad (8)$$

e lembrando que

$$\frac{dm}{dt} = \rho_w \frac{\pi}{2} D_{wet}^2 \frac{dD_{wet}}{dt} \quad (9)$$

além de definirmos

$$\delta = \frac{L\rho_w}{4k_a T_\infty} D_{wet} \frac{dD_{wet}}{dt}$$

podemos reescrever a equação (8) como

$$T_a = T_\infty (1 + \delta) \quad (10)$$

Combinando as equações (2), (9), (10), a lei dos gases ideais e a equação de Clausius-Clapeyron encontramos

$$D_{wet} \frac{dD_{wet}}{dt} = \frac{4D_v M_w P_\infty^\circ}{\rho_w R T_\infty} \left(s_{atm} - \frac{s(D_{wet})}{1 + \delta} \times \exp \left[\frac{L M_w}{R} \left(\frac{T_a - T_\infty}{T_a \cdot T_\infty} \right) \right] \right) \quad (11)$$

em que L é o calor latente de condensação, $s(D_{wet})$ é a taxa de saturação de equilíbrio na superfície da gotícula, s_{atm} é a taxa de saturação atmosférica e P_∞° é a pressão do vapor de saturação do ambiente sobre uma superfície plana de água pura. Esse equação pode ser simplificada, pois em geral verifica-se que $\delta \ll 1$. Isso implica, entre outras coisas, que $T_a = T_\infty = T$. Desse modo, obtemos a equação final que governa a variação do diâmetro de uma gota de nuvem:

$$\frac{dD_{wet}}{dt} = \frac{1}{D_{wet}} \left[\frac{4(s_{atm} - s(D_{wet}))}{\frac{\rho_w R T}{P_\infty^\circ D_v' M_w} + \frac{L\rho_w}{k_a' T} \left(\frac{L M_w}{R T} - 1 \right)} \right] \quad (12)$$

em que substituímos k_a e D_v por k_a' e D_v' , suas versões modificadas que levam em conta efeitos de descontinuidade que podem afetar gotas pequenas ($D_{wet} \ll 1\mu m$). A condutividade térmica modificada do ar é dada por

$$k_a' = \frac{k_a}{1 + \frac{2k_a}{\alpha_T D_{wet} \rho_a c_p} \left(\frac{2\pi M_a}{R T_a} \right)^{1/2}} \quad (13)$$

em que α_T é o coeficiente de acomodação térmica e ρ_a , M_a e c_p são, respectivamente, a densidade, a massa molar e o calor específico do ar. Já a difusividade modificada do vapor de água é dada por

$$D'_v = \frac{D_v}{1 + \frac{2D_v}{\alpha_C D_{wet}} \left(\frac{2\pi M_w}{RT} \right)^{1/2}} \quad (14)$$

sendo α_C o coeficiente de acomodação da água.

Há dois aspectos da equação (12), que descreve a taxa de evaporação ou crescimento de uma gota, que valem serem notados. No numerador, a diferença entre a taxa de saturação do ambiente (i.e., dentro de uma parcela de ar), s_{atm} , e a de equilíbrio na superfície da gota, $s(D_{wet})$, funciona como uma “força” que determina a transferência de massa da água para a gota. Caso $s_{atm} > s(D_{wet})$, então a gota cresce por condensação e, caso $s_{atm} < s(D_{wet})$, a gota diminui devido à evaporação. No caso em que $s_{atm} = s(D_{wet})$ temos uma situação de equilíbrio. Esses cenários estão todos de acordo com a interpretação dada à equação (1) no primeiro relatório. O segundo aspecto é que a taxa de variação do diâmetro é inversamente proporcional ao próprio diâmetro - gotas ativadas pequenas crescem mais rapidamente do que as maiores.

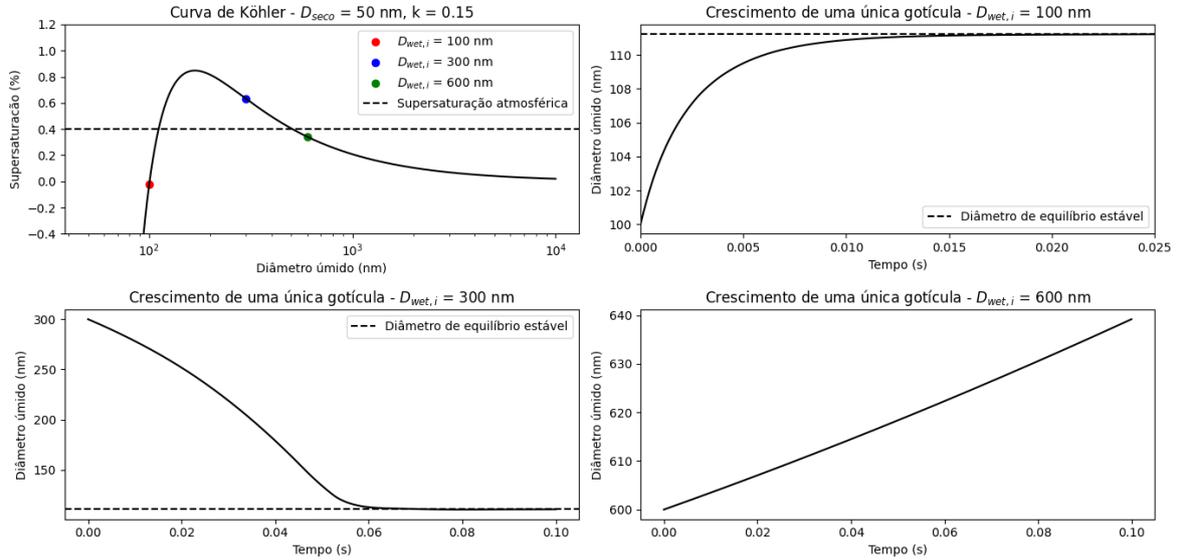


Figura 1: Gráficos da curva de Köhler e do crescimento de uma gotícula de diâmetro seco $D_{seco} = 50$ nm, parâmetro de higroscopicidade $\kappa = 0.15$ e diferentes tamanhos úmidos iniciais. A linha horizontal tracejada no gráfico do painel superior esquerdo indica a supersaturação atmosférica e sua intersecção com a curva de Köhler nos permite identificar os diâmetros de equilíbrio estável e instável.

Para demonstrar o que acabamos de explicar, vejamos um resultado conseguido com o nosso modelo para o crescimento das partículas com condensação de vapor, que resolve numericamente a equação (12). Neste exemplo, consideramos um núcleo de condensação de diâmetro seco $D_{seco} = 50$ nm e parâmetro de higroscopicidade $\kappa = 0.15$, sujeito a uma supersaturação de 0.4%. A figura 1 mostra a curva de Köhler (painel superior esquerdo). Vamos interpretar os resultados para os casos em que $D_{wet,i} = 100$ nm, 300 nm e 600 nm. Primeiramente, relembramos que o diâmetro de equilíbrio estável corresponde ao menor diâmetro $D_{wet,eq}$ tal que $s_{atm} = s(D_{wet,eq})$ e que no nosso caso é aproximadamente 111 nm. Quando $D_{wet,i} = 100$ nm, a supersaturação sobre essa gota é menor do que $s(D_{wet,eq})$ (curva de Köhler, círculo vermelho), e portanto a gota irá crescer até o diâmetro de equilíbrio estável. O crescimento é muito rápido, levando menos de 0.02 s (painel superior direito). Quando $D_{wet,i} = 300$ nm, vemos que a supersaturação sobre essa gota é maior do que $s(D_{wet,eq})$ (curva de Köhler, círculo azul) e a gota deve evaporar até o diâmetro de equilíbrio estável, como vemos no painel inferior esquerdo. Quando $D_{wet,i} = 600$ nm, a supersaturação sobre a superfície da gota é menor do que a de equilíbrio (curva de Köhler, círculo verde), criando um gradiente de pressão no sentido a fazer com que a gota cresça indefinidamente, pois a supersaturação sobre a superfície da gota diminuirá com o crescimento do seu diâmetro. Esse comportamento é reproduzido no gráfico mostrado no painel inferior direito.

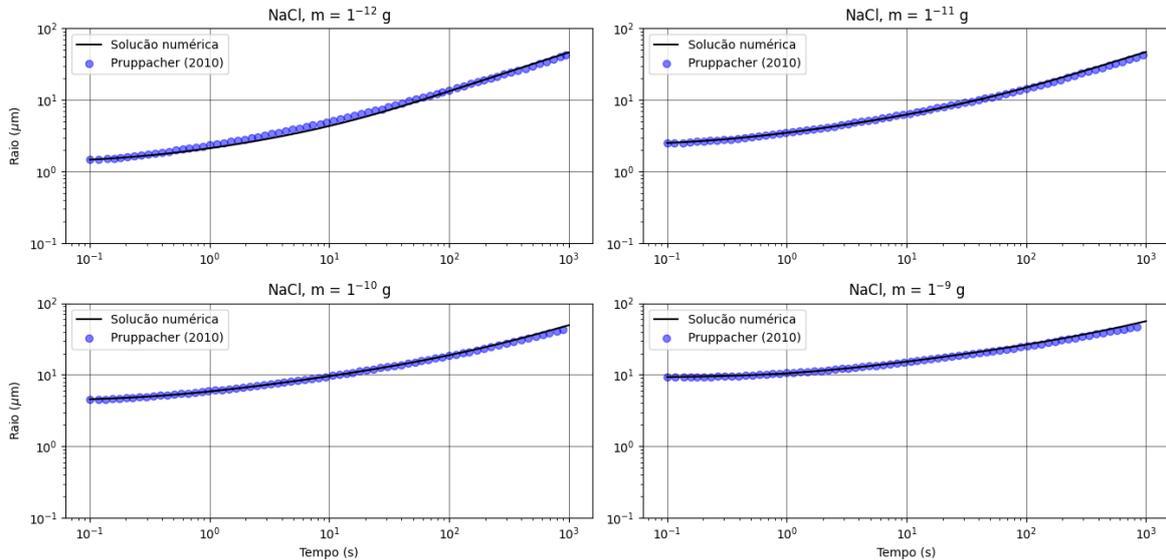


Figura 2: Variação com o tempo do raio de núcleos de condensação compostos por NaCl e que possuem diferentes massas.

A seguir, realizamos uma validação inicial do nosso modelo reproduzindo alguns resultados ilustrados no livro de microfísica de nuvens [5] (capítulo 13, figura 13-2). A simulação é iniciada com uma supersaturação ambiente de 1%, uma temperatura de $T = 293$ K e coeficientes de acomodação $\alpha_T = \alpha_C = 0.045$. Os núcleos de condensação são compostos por NaCl e possuem diferentes massas (10^{-12} g, 10^{-11} g, 10^{-10} g e 10^{-9} g), correspondendo a diferentes raios secos ($0.48 \mu m$, $1.0 \mu m$, $2.2 \mu m$, e $4.8 \mu m$). O diâmetro úmido inicial é aquele na qual a gota se encontra em equilíbrio num ambiente com umidade relativa na qual ocorre deliquescência do sal. A figura 2 apresenta a comparação do nosso resultado para crescimento do raio da gotícula em função tempo com aquele apresentado por [5], onde vemos uma excelente concordância. Identificamos uma pequena diferença nos instantes finais do crescimento dos três núcleos de condensação mais massivos e uma diferença mais significativa no crescimento do núcleo de condensação menos massivo. Essas diferenças, segundo nosso entendimento, se devem a erros no método numérico utilizado, que pode também ter sido diferente do método utilizado pelo autor original.

4.2 Crescimento de uma distribuição monodispersa

Nesta subseção, expandimos o que foi mostrado na subseção anterior para o caso de uma população monodispersa de aerossóis. Na simulação que iremos mostrar, levaremos em conta as variações do conteúdo de água líquida, ou *liquid water content* (LWC), da taxa de saturação do ambiente e da temperatura, que passam a se tornar relevantes na presença de um número grande de núcleos de condensação. A taxa de variação da temperatura pode ser obtida por um balanço energético: a energia correspondente à uma variação de temperatura dT deve ser igual ao calor latente liberado pela condensação de vapor de água. Assim:

$$m_d c_p dT + L dm_v = 0 \implies \frac{dT}{dt} = \frac{L}{c_p} \frac{dw_L}{dt} \quad (15)$$

em que utilizamos o fato de a massa de ar seco m_d ser constante e que $dw_v = -dw_L = dm_v/m_d$, onde w_v e w_L são as razões de mistura do vapor e da água líquida, respectivamente. A razão de mistura da água líquida é dada por

$$w_L(D_{wet}) = \frac{\pi \rho_w}{6 m_d} n (D_{wet}^3 - D^3) \quad (16)$$

em que D é o diâmetro seco e n é o número de núcleos de condensação.

Na situação que descrevemos, a pressão P é constante e é designada no início da simulação. A pressão de vapor por sua vez é dada por

$$P_v(w_v) = \frac{w_v}{w_v + \epsilon} P \quad (17)$$

em que w_v é a razão de mistura do vapor. A pressão do vapor de saturação sobre uma superfície plana de água pura, P° , é dada por

$$P^\circ(T) = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4 + a_5T^5 + a_6T^6 \quad (18)$$

que é válida no intervalo e $-50^\circ \leq T \leq 50^\circ\text{C}$ e cujos coeficientes a_i 's podem ser encontrados em [6]. Por fim, utilizando as equações (18) e (17), podemos calcular a taxa de saturação s_{atm} :

$$s_{atm}(w_v, T) = \frac{P_v(w_v)}{P^\circ(T)}. \quad (19)$$

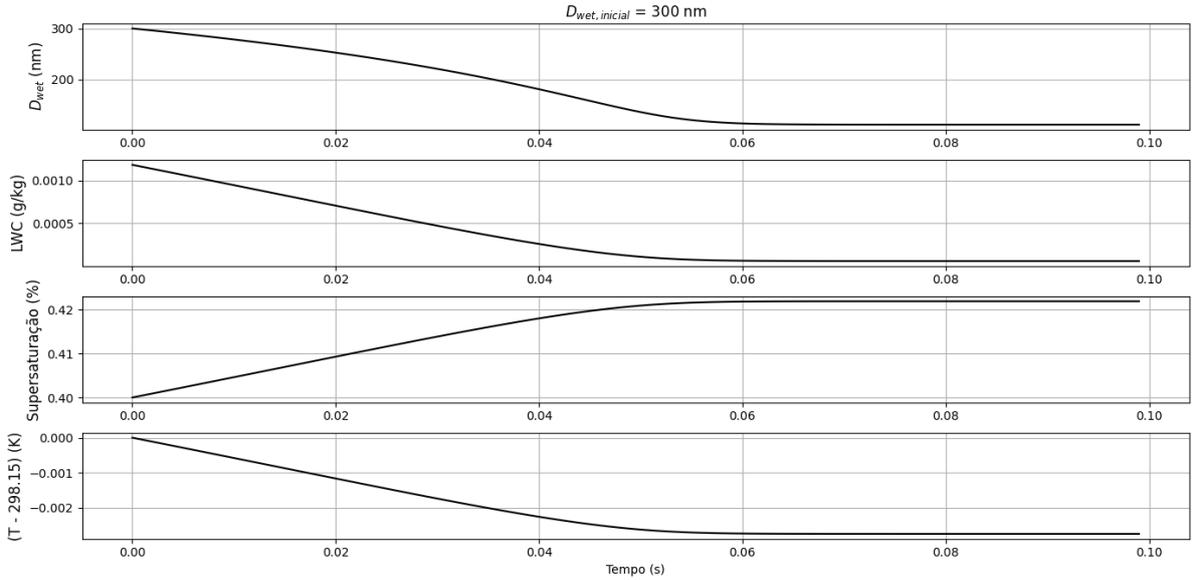


Figura 3: Variação com o tempo do diâmetro úmido, LWC , supersaturação e da diferença $(T - T_0)$, que T_0 é a temperatura inicial, num volume de ar com 10^{10} núcleos de condensação de diâmetro seco $D = 50$ nm, diâmetro úmido inicial $D_{wet} = 300$ nm e parâmetro de higroscopicidade $\kappa = 0.15$.

Tomamos o mesmo exemplo discutido na seção 4.1. Contudo, agora temos uma população de partículas ($N = 10^4 \text{cm}^{-3}$) com $\kappa = 0.4$, diâmetro seco $D = 50$ nm, e diâmetro úmido inicial $D_{wet} = 300$ nm, em um ambiente com temperatura inicial $T = 298.15$ K

e supersaturação atmosférica $S_{atm} = 0.4\%$. Assim como no caso da figura 1, estas partículas precisariam de maior supersaturação para estarem em equilíbrio, e portanto irão evaporar. Como podemos observar no 1º painel da figura 3 (de cima para baixo), a variação do diâmetro se dá praticamente da mesma forma do que no caso de um único núcleo de condensação (ver figura 1). A medida que as gotas evaporam, o conteúdo de água líquida LWC diminui (2º painel) e a energia necessária para que o processo ocorra leva à uma diminuição da temperatura T (4º painel). O aumento na concentração de vapor leva à um aumento na taxa de saturação (3º painel), de acordo com a equação (19).

4.3 Introdução do modelo da parcela de nuvem

Introduzimos agora o modelo da parcela de nuvem, o que nos permitirá estudar a formação de nuvens de base quente nos seus primeiros estágios, nos quais possuem apenas gotículas de água líquida, enquanto o crescimento das gotas pode ser explicado apenas pela condensação de vapor. Fazemos as premissas usuais acerca da parcela, i.e, que é termicamente isolada do ambiente e que sua energia cinética macroscópica é desprezível frente à sua energia total. A ascensão da parcela ocorre a velocidade constante, prescrita no início da simulação. No interior dessa parcela encontra-se uma certa população de partículas de aerossol, cuja distribuição da concentração de tamanhos é bem descrita por uma distribuição lognormal ([6]).

$$\frac{dN_{CN}(D)}{d \log D} = \sum_{i=1}^3 \frac{N_{CN,i}}{\sqrt{2\pi} \log \sigma_{g,i}} \exp \left[- \left(\frac{\log D - \log D_{g,i}}{\sqrt{2} \log \sigma_{g,i}} \right)^2 \right] \quad (20)$$

onde $N_{CN,i}$ é a concentração total de partículas, $\sigma_{g,i}$ é o desvio padrão geométrico e $D_{g,i}$ o diâmetro geométrico médio, com índice $i = 1, 2, 3$ representando cada uma das 3 modas. Todos esses parâmetros possuem significado físico e podem ser determinados experimentalmente.

À medida em que a parcela de nuvem sobe, o modelo simula a expansão e o resfriamento do ar, as mudanças na umidade relativa e demais parâmetros relevantes e, por fim, o crescimento das partículas de aerossol. O crescimento se dá apenas pela deposição de vapor de água, ou seja, os processos de colisão-coalescência e de entranhamento não foram incluídos. Esses processos podem ser negligenciados nos primeiros estágios de formação de nuvens rasas. As equações principais do modelo são apresentados no que segue. A taxa de variação da temperatura dT quando a parcela sobe uma distância dz é dada por

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{L}{c_p} \frac{dw_v}{dz} - \frac{g}{c_p}, \quad (21)$$

em que c_p é o calor específico do ar seco, L é o calor latente de condensação e g é a aceleração da gravidade, e pode ser obtida a partir de um balanço energético: a energia correspondente à uma variação dT de temperatura mais o calor latente devido à condensação do vapor de água deve ser igual ao trabalho necessário para a expansão da parcela de ar. A velocidade vertical é dada por

$$W = \frac{dz}{dt} \quad (22)$$

que combinada com a equação (21) e com variação da quantidade de vapor de água w_v dentro da parcela, dada por $dw_v = -dw_L$, nos permite calcular a variação da temperatura em função do tempo. A razão de mistura de água líquida é

$$w_L = \frac{m_w}{m_d} = \frac{\pi \rho_w}{6m_d} \sum_{i=1}^N n_i (D_{wet,i}^3 - D_i^3) \quad (23)$$

em que n_i , $i = 1, 2, \dots, N$, é a quantidade de aerossóis de diâmetro seco D_i dentro da parcela, de acordo com a discretização da população de aerossóis que apresentaremos mais abaixo. A taxa de variação da pressão total pela altura é escrita como

$$\frac{dP}{dz} \approx \frac{dP_d}{dz} = -g\rho_d = -\frac{gM_d P_d}{RT}. \quad (24)$$

em que P_d é a pressão do ar seco. As equações (21), (22), (23), (24) em conjunto com as equações (18), (17) e (12) constituem o sistema fechado de EDO's acopladas que são integradas simultaneamente, para cada uma das N classes de tamanho, resultando numa descrição completa da evolução temporal da população de CCN.

O crescimento das partículas de aerossol é feito por meio de uma *estrutura de tamanho*. Uma estrutura de tamanho é definida como uma distribuição de tamanhos (diâmetros ou raios) que evoluem com o tempo [10]. Nesse projeto, adotamos o que é chamado de *full moving structure* ou *grade móvel*. Nessa abordagem, realizamos a discretização da distribuição das partículas secas em bins logaritmicamente distribuídos. Todas as n_i partículas de aerossol pertencentes ao certo i -ésimo bin possuem o mesmo parâmetro de higroscopicidade κ_i e o mesmo diâmetro seco D_i , que corresponde à extremidade esquerda desse bin. Para validar o nosso modelo, comparamos nossos resultados com casos encontrados em [2].

4.3.1 McFiggans et al. (2006)

A distribuição utilizada em McFiggans [2] tem uma única moda, diâmetro geométrico médio $D_g = 140$ nm, desvio padrão geométrico $\sigma_g = 1.70$, concentração total $N_{CN} = 300$ cm^{-3} e foi discretizada em $n = 300$ bins, com diâmetros variando logaritmicamente na faixa de D_g/s_g^5 a $D_g\sigma_g^5$. As partículas são compostas apenas por sulfato de amônio $(NH_4)_2SO_4$ e possuem parâmetro de higroscopicidade $\kappa = 0.61$. A parcela sobe com uma velocidade constante $W = 0.5$ m/s e as condições que iniciam a simulação são uma umidade relativa $RH = 95$ %, uma temperatura $T_0 = 300K$ e uma altitude $z_0 = 1000$ m. O resultado pode ser visto na figura 4 abaixo.

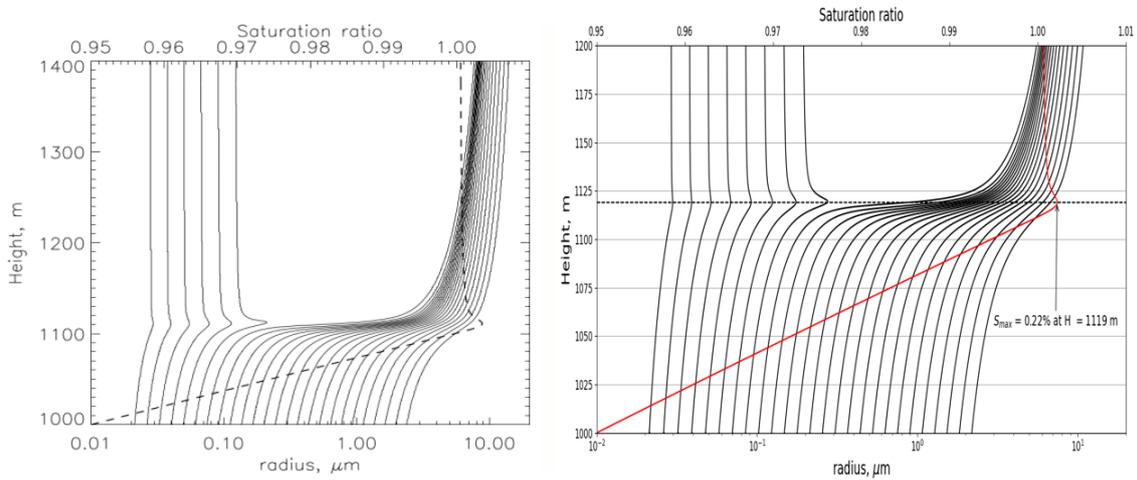


Figura 4: Gráficos do crescimento das partículas de aerossol (linhas sólidas) e da variação da taxa de saturação (em vermelho/tracejado) por altura. À esquerda temos o resultado obtido por McFiggans et al. (2006) e à direita temos o resultado obtido pelo nosso modelo. A seta no nosso gráfico indica a máxima supersaturação atingida e a altura em que ela ocorre.

Acompanhando a curva em vermelho, que indica a taxa de saturação ambiente, vemos que enquanto estamos num regime de subsaturação, todas as gotas crescem continuamente. Quando passamos a ter um regime de supersaturação, o crescimento se torna mais acentuado. A conversão de vapor em água e a liberação de calor latente reduzem a supersaturação, que alcança o valor máximo $SS_{max} = 0.22$ % em 1119 m, em concordância com [8]. A partir desta altitude, uma fração das partículas foi ativada, tendo uma “explosão” no tamanho pois permanecem em uma condição de $s_{atm} > s(D_{wet})$. Por outro lado, outra fração das partículas começa a diminuir, lentamente, por evaporação,

pois estão em uma condição de $s_{atm} < s(D_{wet})$. A partir da altitude do SS_{max} , nenhuma outra gota será ativada. A concentração total de gotas ativadas no final da simulação foi de 259 cm^{-3} , em boa concordância com o valor esperado de 260 cm^{-3} .

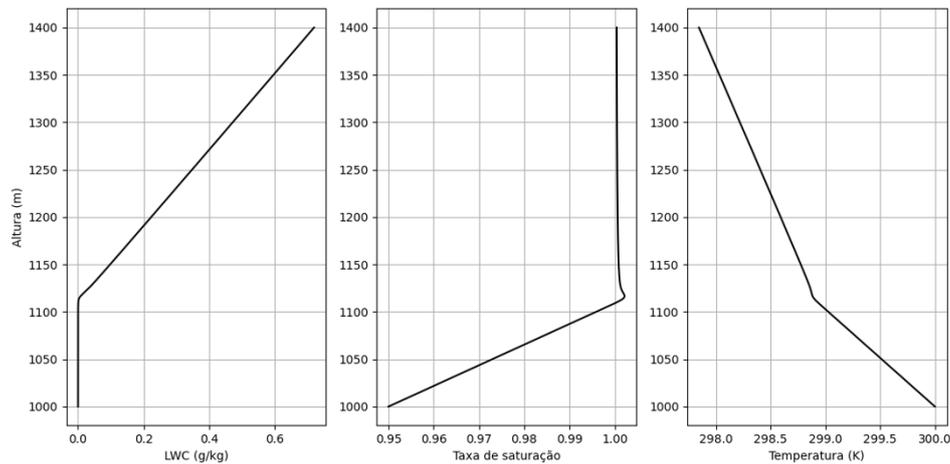


Figura 5: Variação de propriedades da parcela com a altitude: conteúdo de água líquida (esquerda), taxa de saturação (centro), e temperatura (direita). Em cada painel, podemos identificar o momento em que uma fração das partículas de aerossol é ativada.

Na figura 5, mostramos as variações do conteúdo de água líquida LWC , da taxa de saturação s_{atm} e da temperatura T dentro da parcela, todas em função da altura z . Podemos observar no painel mais à esquerda o exato momento em que uma fração das gotas é ativada, com um grande crescimento da deposição de vapor nos núcleos de condensação, o que corresponde a um aumento proporcional no conteúdo de água líquida no interior da parcela. Esse momento também pode ser identificado no gráfico da variação da temperatura com a altura, no painel mais à direita: a grande quantidade de calor latente liberada durante a condensação do vapor de águas nas gotas ativadas diminui a taxa de variação da temperatura. Outro ponto interessante é que, após a ativação das gotas, as taxas de variações do LWC e da temperatura permanecem constantes. Isso se deve ao fato de que a elevada taxa de vapor sendo depositada sobre as gotas também permanece praticamente constante após a ativação. Esse vapor depositado, no entanto, não é suficiente para que haja crescimento significativo dessas gotas, como podemos ver na figura 4.

5 Plano de Atividades

A tabela a baixo mostra o cronograma original, com a lista de atividades planejadas e o estágio de desenvolvimento de cada atividade. Todas as atividades planejadas para os primeiros 12 meses da bolsa foram cumpridas, exceto pela participação no SIIC-USP (Simpósio Internacional de Iniciação Científica e Tecnológica da USP). Em 2020, a inscrição no SIIC-USP foi anterior a entrega do primeiro relatório e não havia resultados suficientes para serem apresentados. Em 2021, o SIIC-USP ocorrerá entre os dias 15/09/2021 e 29/10/2021.

O cronograma abaixo também mostra que algumas atividades planejadas para o período de renovação da bolsa (meses 13 a 21) já foram cumpridas. Em particular, o modelo parcela já foi implementado e a comparação com os resultados de McFiggans et al. (2006) já foi realizada (ver seção 4.3.1). De fato, também já foram realizadas simulações variando simultaneamente a velocidade vertical e a concentração de partículas. Contudo, a comparação com os resultados de Reutter et al. (2009) nos indicam que pode haver algum erro de programação no nosso modelo, pois ele está ativando mais gotículas do que esperado (50% a mais) para algumas combinações de velocidade e concentração.

Atividade	Meses	Situação
Estudo sobre higroscopicidade de aerossóis	1 a 12	Concluído
Implementar o modelo κ -Köhler em Python	4 a 6	Concluído
Simular o crescimento de distribuição monodispersa	7 a 8	Concluído
Discussão dos resultados	9	Concluído
Preparação do relatório e pedido de renovação	10	Concluído
Apresentação de trabalho no SIIC-USP	11	Não houve
Implementar o modelo parcela em Python	11 a 14	Concluído, modelo sendo “debugado”.
Simular os casos McFiggans2006 e Reutter2009	15 a 17	Primeiro caso concluído.
Discussão dos resultados	18 a 20	Em andamento
Apresentação de trabalho no SIIC-USP	20	A fazer
Preparação do relatório final	21	A fazer

6 Pedido de Renovação

Não houve pedido de renovação. O bolsista optou por buscar um estágio após o encerramento da bolsa vigente e portanto não irá continuar desenvolvendo este projeto.

7 Reserva Técnica

Não houve utilização da reserva técnica.

Referências

- [1] Wallace, J., and P. Hobbs, 2006: Atmospheric science: an introductory survey, 2nd Edition, International Geophysics Series, Vol. 92, ISBN 0-12-732951-X, Academic Press, USA.
- [2] McFiggans, G. et al. (2006). The effect of physical and chemical aerosol properties on warm cloud droplet activation. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6(9):2593-2649.
- [3] Pauliquevis Junior, T. M. (2005). Os efeitos de aerossóis emitidos por queimadas na formação de gotas de nuvens e na composição da precipitação na Amazônia. PhD thesis, Instituto de Física, University of São Paulo, São Paulo.
- [4] Petters, M. and Kreidenweis, S. (2007). A single parameter representation of hygroscopic growth and cloud condensation nucleus activity. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7(8):1961-1971.
- [5] Pruppacher, H. R., Klett, J. D., and Wang, P. K. (1998). *Microphysics of clouds and precipitation*. Taylor and Francis.
- [6] Seinfeld, J. H., and Pandis, S. N. (2016). *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change* (3rd ed.). Wiley.
- [7] WebPlotDigitizer - Extract data from plots, images, and maps. (2020). WebPlotDigitizer. <https://automeris.io/WebPlotDigitizer/>
- [8] Araújo, A. S. A. (2017). Efeitos de poluição urbana na higroscopicidade dos aerossóis e na ativação de gotas em nuvens quentes na Amazônia no âmbito do experimento

GoAmazon 2014/5. Master's thesis, Instituto de Física, University of São Paulo, São Paulo.

- [9] Reutter, P., Su, H., Trentmann, J., Simmel, M., Rose, D., Gunthe, S., Wernli, H., Andreae, M., and Pöschl, U. (2009). Aerosol-and updraft-limited regimes of cloud droplet formation: influence of particle number, size and hygroscopicity on the activation of cloud condensation nuclei (ccn). *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9(18):7067-7080.
- [10] Jacobson, M.Z.(2005). *Fundamentals of Atmospheric Modeling*. Cambridge University Press.