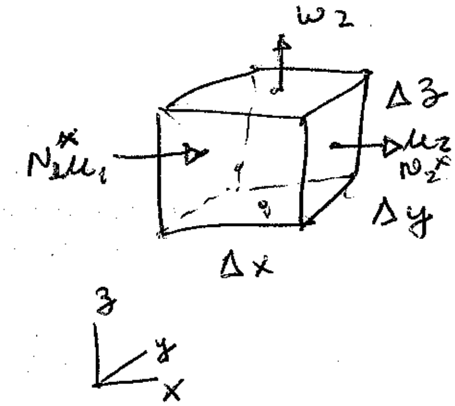
AULA 3 Continuidade e tempo



Consideramos um volume imaginário onde não há nenhum processo físico/químico alterando ~~o~~ o ar. Neste caso, cada molécula de ar é conservada.

O número de moléculas dentro do volume será também conservado a menos que o vento esteja modificando seu conteúdo.

$$\begin{cases} \#\ \text{moléculas na caixa} = N\,\Delta x\,\Delta y\,\Delta z \\ N\ \text{concentração em número} \end{cases}$$

Δx, Δy e Δz são fixos, então a variação na caixa é simplesmente:

$$\Delta N\,\Delta x\,\Delta y\,\Delta z$$

O transporte do vento vai resultar em um fluxo de partículas pelas paredes da caixa:

$$\text{fluxo}\,[\#/m^2/s] = N \cdot \text{velocidade}$$

Para calcular o # que ~~entrou no~~ cruzou a parede, precisamos da área e do tempo

$$\text{através da parede}\,[\#] = N \cdot \text{vel} \cdot \text{área} \cdot \text{tempo}$$

Assim o nº de partículas vai mudar:

$$\Delta N \, \Delta x \, \Delta y \, \Delta z = (N_1^x u_1 - N_2^x u_2) \, \Delta y \, \Delta z \, \Delta t$$
$$+ (N_1^y v_1 - N_2^y v_2) \, \Delta x \, \Delta z \, \Delta t$$
$$+ (N_1^z w_1 - N_2^z w_2) \, \Delta x \, \Delta y \, \Delta t$$

Dividindo por Vol$\cdot \Delta t$, Temos:

$$\frac{\Delta N}{\Delta t} = \frac{N_1^x u_1 - N_2^x u_2}{\Delta x} + \frac{N_1^y v_1 - N_2^y v_2}{\Delta y} + \frac{N_1^z w_1 - N_2^z w_2}{\Delta w}$$

Tomando os limites $\Delta t \to 0$, $\Delta x \to 0$, $\Delta y \to 0$, $\Delta z \to 0$,

Temos uma diferencial

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(Nu) - \frac{\partial}{\partial y}(Nv) - \frac{\partial}{\partial z}(Nw)$$

$$\boxed{\frac{\partial N}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (N\vec{v})}$$

Isso é como a expressão de conservação da carga, por exemplo, onde o fluxo local de carga é a densidade de corrente $\vec{J}$:

$$\boxed{\frac{\partial q}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}}$$ conserv. de carga

Significa

Só há variação local de uma quantidade se houver divergência do seu fluxo.

Como a massa de cada molécula não muda, então podemos escrever a conservação da densidade:

$$\rho = \frac{N\, m_i}{A} \Rightarrow \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{v})}$$

cte

Essa é a forma da eq. da continuidade c/ a divergência do fluxo. Há outras formas de se escrever.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla\cdot(\rho\vec{v}) = -\rho\,\vec{\nabla}\cdot\vec{v} - \vec{v}\cdot\vec{\nabla}\rho$$

Mas a derivada total é:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t}\frac{dt}{dt} + \frac{dx}{dt}\frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{dy}{dt}\frac{\partial \rho}{\partial y} + \frac{dz}{dt}\frac{\partial \rho}{\partial z}$$

$$\equiv \boxed{\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v}\cdot\vec{\nabla}\rho}$$

alguns livros usam essa notação

lagrangeano | euleriano

Substituindo:

$$\cancel{\frac{\partial \rho}{\partial t}} = -\rho \nabla\cdot v - \left(\frac{d\rho}{dt} - \cancel{\frac{\partial \rho}{\partial t}} \right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \vec{v}}$$

se o fluido for incompressível $\nabla\cdot v = 0 \Rightarrow \boxed{\frac{D\rho}{Dt} = 0}$

Essa é a forma com a divergência da velocidade. O termo d/dt é a variação seguindo a partícula, enquanto os termos $\partial/\partial x$ são "parados", ou locais.

Em termos da concentração específica q (Kg do traçador pelo Kg da massa total de ar), a equação da continuidade fica:

$$\rho_{gás} = q_{gás}\, \rho_{ar\text{-}total}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial (q \rho_a)}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot (\vec{v} \rho_a q)$$

$$\cancel{q \frac{\partial \rho_a}{\partial t}} + \rho_a \frac{\partial q}{\partial t} = \cancel{-q \vec{\nabla}\cdot(\rho_a \vec{v})} - \rho_a \vec{v}\cdot\vec{\nabla} q$$

pela eq continuidade p/ ar

Portanto:

$$\boxed{\frac{\partial q}{\partial t} = -\vec{v}\cdot\vec{\nabla} q}$$

Como a derivada total é:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \vec{\nabla}$$, então temos:

$$\boxed{\frac{dq}{dt} = 0}$$

Isso significa ~~de~~ que se não há fontes ou sumidouros, a concentração específica é conservada ao longo da trajetória da ~~partícula~~ parcela de ar.

DETALHES

① Essa dedução é fácil de entender mas deixamos passar alguns detalhes. A lei básica de conservação é:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = - \nabla \cdot \text{Fluxo}$$

~~Mas~~ Mas assumimos que Fluxo = N · Vento. Também há um fluxo devido a difusão molecular, que é dado pela lei de Fick:

$$\vec{F}_{dif} = - D \, \vec{\nabla} N$$

$$\underset{\#\,m / s}{?} \qquad \frac{m^2}{s} \qquad \frac{\#}{m}$$

D é o coeficiente de difusão molecular $\sim 0.2\ cm^2/s$

② Além disso, consideramos que não haviam fonte nem sumidouros. Isso não é verdade, mas não invalida em nada nossas deduções.

Assim a eq de continuidade, básica é:

$$\boxed{\frac{\partial N}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot(N\vec{v}) + D\nabla^2 N + F - S}$$ completo

onde F e S (#/s) são as fontes e sumidouros.

Escrevemos em geral:

$$F - S \equiv \sum_{i=1}^{N} R_i \quad N \text{ processos} \begin{cases} \text{química} \\ \text{radiação} \\ \text{turbulência} \\ \text{convecção} \\ \vdots \end{cases}$$

Além disso o termo de difusão geralmente pode ser desprezado pois na troposfera e estratosfera não é importe.

Einstein's (Browniano) $\Delta t = \frac{\Delta x^2}{2D} = \frac{(10\,m)^2}{2\cdot 0.2\,cm^2/s} \simeq 2,5\times 10^6\,s$

$\sim$ 30 dias p/ andar 10 m

Como as velocidades são muito menores, o termo em $\nabla^2 N$ é geralmente desprezado.

Em torno de 100 km $D \gg D_{superf}$ pois a pressão $\ll P_{atm}$ (maior livre caminho médio). Então a dif é importante!

Analogamente, escrevemos:

$$\frac{dq}{dt} = \sum R'$$, onde R' é R em unidades de concentração específica

Notem que esta eq está na forma lagrangeana, isto é, seguindo o fluido, devido ao d/dt. Ela é válida com a ~~co~~ concentração específica e não c/ o número ou a densidade, pois esses dois mudam ao longo da trajetória da parcela quando P, T mudam!

A simplicidade dessa equação é o que está ~~por trás~~ nas bases dos modelos de parcela que seguem parcelas de ar, isoladas, e descrevem o que acontece c/ a química/microfísica ao longo da trajetória

Estes modelos tem problemas:

① não permitem a mistura de volumes

② ainda é preciso um referencial euleriano, fixo na Terra, p/ representação geográfica.

Geral

A eq da continuidade representa a conservação de massa no nosso sistema. Ela é ~~tempo~~ semelhante a eq de conservação de momentum:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\nabla\cdot(N\vec{v}) + D_N\nabla^2 N + F_N - S_N \quad \text{(massa)}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\vec{v}\cdot\nabla q + D_q\nabla^2 q + F_q - S_q \quad \text{(razão de mistura)}$$

Navier-Stokes
$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\vec{U}\cdot\vec{\nabla}\vec{U} + \nu\nabla^2 U - \frac{\vec{\nabla}P}{\rho} + \vec{g} \quad \text{(momento)}$$

$\boxed{U\cdot\nabla U}$ é o termo de advecção semelhante ao que aparece na eq para a concentração específica pois assim como q, U não muda se P e T variarem

$\boxed{\nu\nabla^2 U}$ é o termo de difusão e também pode ser desprezado em várias situações.

$\boxed{\frac{\nabla P}{\rho}}$ é a força gradiente de pressão e $\boxed{\vec{g}}$ é a gravidade, elas funcionam como fonte e sumidouros de momento, já que $\vec{F} = d\vec{P}/dt$ pela 2ª lei de Newton.

A equação da continuidade na sua forma euleriana é uma eq. diferencial parcial de 1ª ordem. Ela pode ser resolvida dadas as condições iniciais, e as condições de contorno.

Em um modelo global, as condições de contorno horizont. são do tipo periódicas c/ período igual ao raio da Terra. As C.C. verticais são do tipo fluxo, com fluxo zero no topo e emissões na superfície.

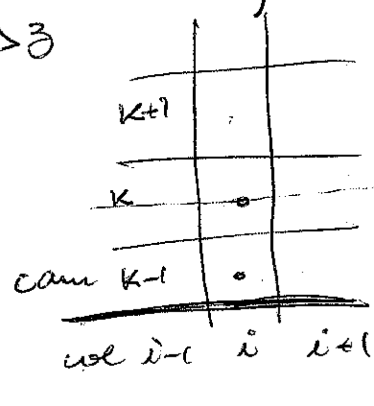
A solução em geral precisa ser calculada numericamente!

Ou seja, precisamos discretizar o espaço e o tempo em um número finito de intervalos. Por exemplo, desprezando o termo de difusão e as fontes:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\nabla \cdot (N\vec{v})$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\left\{ \frac{\partial}{\partial x}(Nu) \cancel{+ \frac{\partial}{\partial y}(Nv)} + \frac{\partial}{\partial z}(Nw) \right\} \qquad 2D$$

$$\frac{N_{t+1}^{k,i} - N_{t}^{k,i}}{\Delta t} = -\left\{ \frac{Nu|^{k,i+1} - Nu|^{k,i-1}}{2\Delta x} + \frac{Nw|^{k+1,i} - Nw|^{k-1,i}}{2\Delta z} \right\}$$



Mas como fazer a derivada na superfície?

Ou seja, definindo o fluxo nos M+1 níveis intermediários (numerados de Ø até M) podemos usar a mesma eq para resolver:

$$
\begin{cases}
F_0 = F_{sfc} \\
F_K = w_K \dfrac{N_{K+1} + N_K}{2} \\
F_M = F_{topo} = 0
\end{cases}
$$

Exercício

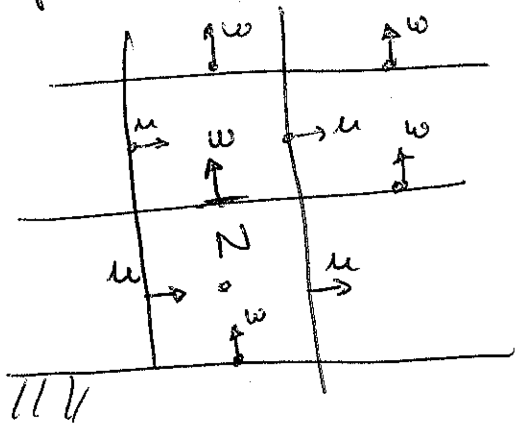
Resolver o problema em 1 coluna:

$$
\begin{cases}
w = 1\,m/s \\
u = 0\,m/s \\
F_{topo} = 0 \ \frac{\#}{cm^3}\frac{m}{s} \\
F_{sfc} = 10/cm^2/s
\end{cases}
\qquad
C.I. \begin{cases}
N = 0 \text{ na coluna interna} \\
\text{Integre por 1 h com } \Delta t = 10\,s
\end{cases}
$$

$\Delta z = 50\,m$, model top $= 2\,Km$ (40 níveis)

3D

O que importa para gente é o fluxo $N\vec{v}$, portanto o vento tem que ser calculado ou interpolado para as laterais do grid box



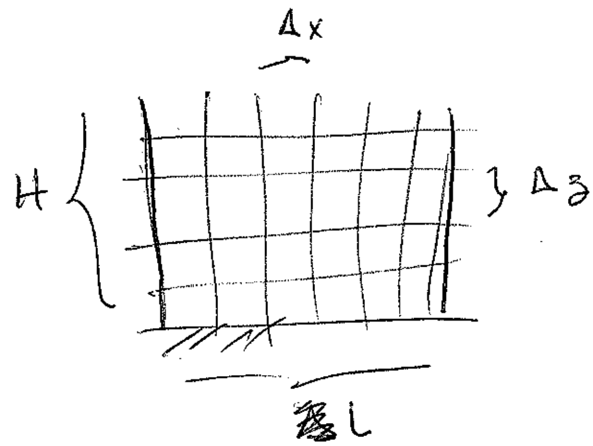
Por hora, vamos fazer um caso bem simples $u = 10\,m/s = cte$ e $w = 0$

$$N^{k,i}_{t+1} = N^{k,i}_{t} - \Delta t\, u \,\frac{N^{k,i+1} - N^{k,i-1}}{2\Delta x}$$

Exercício (2D)

$L = 10\,km$
$\Delta x = 500\,m$ $\Rightarrow$ 20 colunas

$\Delta z = 50\,m$
$H = 1\,km$ $\Rightarrow$ 20 colunas



Cond. inicial

$N = 0$, exceto entre 500 - 700 m $\Rightarrow N = 100\,/cm^3$

Contorno

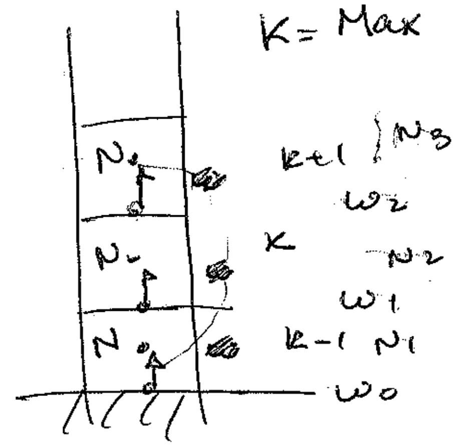
u = cte no tempo $= 0 + z\,\frac{10\,m/s}{1\,km}$

~~[illegible]~~

$w = 0$

cíclico na fronteira $N(x=0) = N(x=10\,km)$

O que importa é o fluxo $N\vec{v}$, é a derivada dele que nos dá o $\partial N/\partial t$



caso simples em 1D

Resolvendo o problema em apenas uma coluna, temos:

$$1<K<Max \qquad N^{K}_{t+1} = N^{K}_{t} - \Delta t \, \frac{w^{k} N_t^{k+1/2} - w^{k-1} N_t^{k-1/2}}{\Delta z}$$

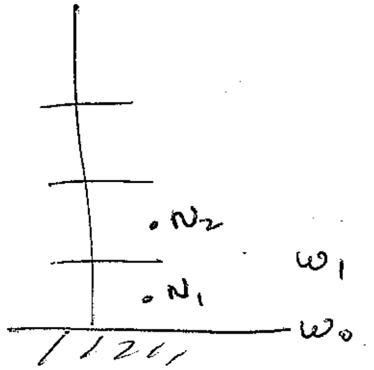
Para a 1ª camada e para a última, temos que resolver separadamente:

$$N^{1}_{t+1} = N^{1}_{t} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(w_1 N_t^{1+1/2} - F_{sfc} \right)$$

$$N^{M}_{t+1} = N^{M}_{t} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(0 - w^{M-1} N_t^{M-1/2} \right)$$

— // —— // ——

$$F_K^t = w_K^t \, \frac{N^t_{K+1} + N^t_K}{2} = w_K N_t^{K+1/2}$$



$$\begin{cases} N^{K}_{t+1} = N^{K}_{t} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(F_K - F_{K-1} \right) & 1<K<M \\ N^{1}_{t+1} = N^{1}_{t} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(F_1 - F_{sfc} \right) & K=1 \\ N^{M}_{t+1} = N^{M}_{t} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(F_{TOP} - F_{M-1} \right) & K=M \end{cases}$$