

Modelagem Numérica da Atmosfera – Parte 2

<http://www.fap.if.usp.br/~hbarbosa>

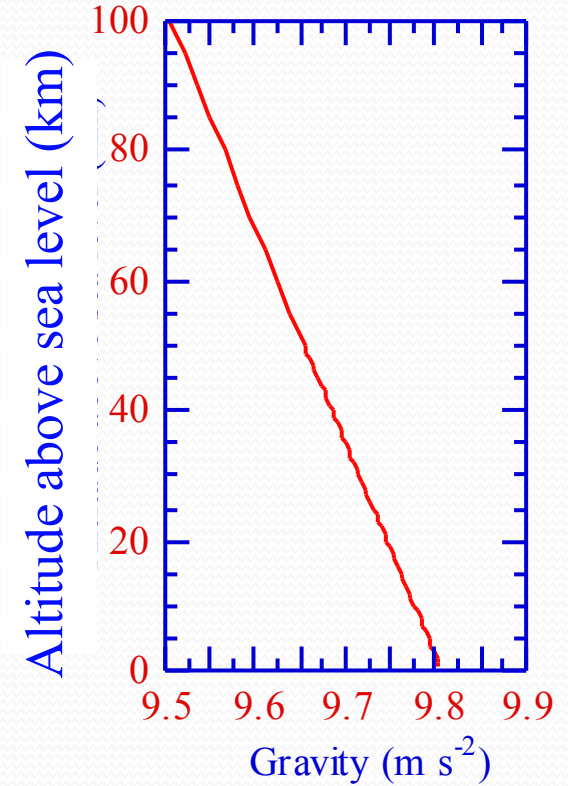
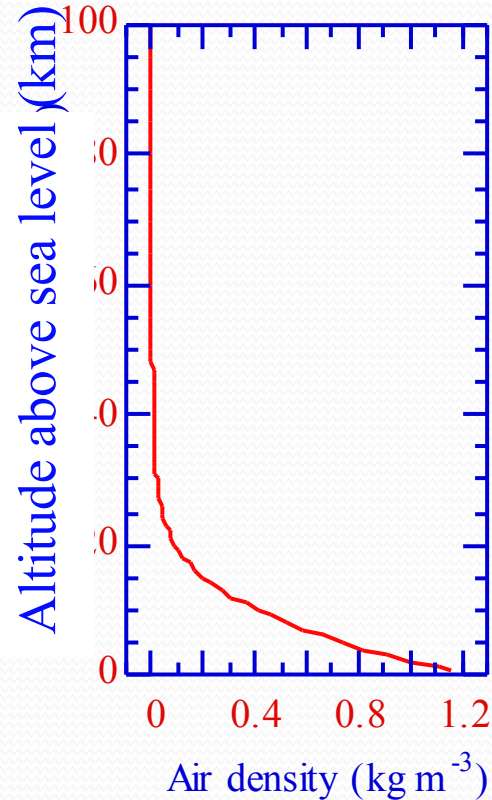
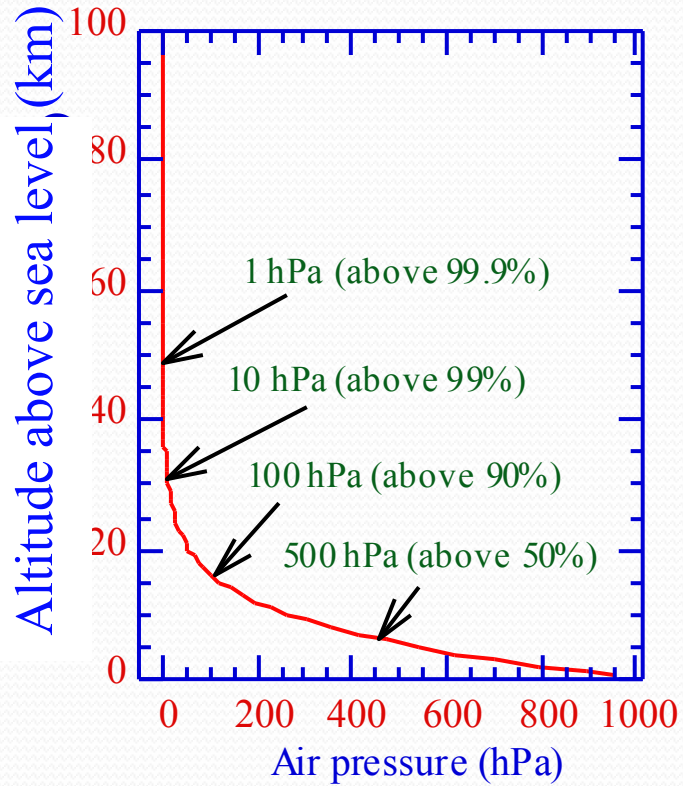
Henrique M. J. Barbosa
Instituto de Física – USP
hbarbosa@if.usp.br



Composição da atmosfera

	Mixing Ratio (%)	Mixing Ratio (ppmv)
<u>Fixed Gases</u>		
Nitrogen (N ₂)	78.08	780,000
Oxygen (O ₂)	20.95	209,500
Argon (Ar)	0.93	9,300
<u>Variable Gases</u>		
Water Vapor (H ₂ O)	0.00001-4	0.1-40,000
Carbon Dioxide (CO ₂)	0.0375	375
Methane (CH ₄)	0.00018	1.8
Ozone (O ₃)	0.000003-0.001	0.03-10

Pressão, Densidade e Gravidade



Concentração e densidade

Mode	Diameter (μm)	Number (#/cm³)	Densidade (g/m³)
Gas molecules	0.0005	2.45×10^{19}	1200
Aerossol			
Pequeno	< 0.2	10^3 - 10^6	0.000001
Médio	0.2-2	1 - 10^4	<0.00025
Grande	1-100	<1 – 10	<0.0005
Hidrometeoros			
Neblina	10-20	1-1000	
Nuvem	10-200	1-1000	
Garoa	200-400	0.01-1	0.01 – 0.1
Chuva	1000-8000	0.001-0.01	

Pressão hidrostática

- Peso por unidade de área em uma certa altitude

$$p_a(z) = \int_z^{\infty} \rho_a(z) g(z) dz$$

p_a = pressão do ar (1 Pa = 1 kg m⁻¹ s⁻² = 0.01 hPa = 0.01 mb)

ρ_a = densidade do ar (kg/m³)

g = gravidade (m/s²)

z = altitude (m)

Valor típico na superfície

101,325 Pa = 1013.25 hPa = 1013.25 mb = 1.01325 bar

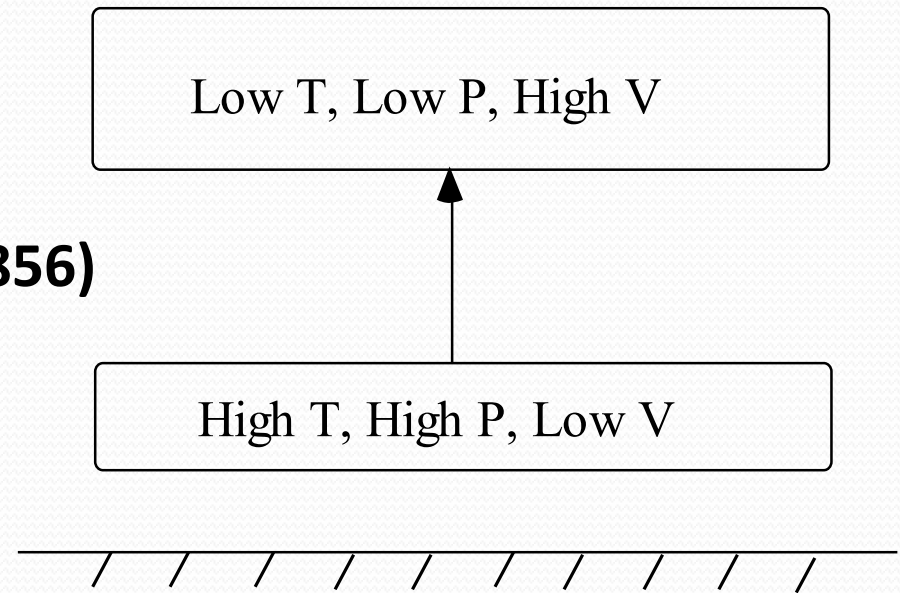
760 mm Hg = 760 torr

10,300 kg m⁻²

Equação de estado

- **Lei de Boyle (1661)**
 - $P \sim 1/V$ para $T = \text{cte}$
- **Lei de Charles (1787)**
 - $V \sim T$ para $P = \text{cte}$
- **Lei de Avogadro (1776-1856)**
 - $V \sim n$ para $P, T = \text{cte}$
- **Gases ideais**
 - $P V = n R^* T$

Levantando uma parcela



Gases perfeitos

$$p = \frac{nR^*T}{V} = \frac{nN_A}{V} \left(\frac{R^*}{N_A} \right) T = NkT = \frac{nm_a}{V} \left(\frac{R^*}{m_a} \right) T = \rho R'T$$

R^* = cte. univ. dos gases = 8.31 J / K / mol

R' = cte. para o ar = 287 J / Kg / K

N_A = número de Avogadro = 6.02×10^{23} mol⁻¹

n = número de moles

N = gas conc. (molec. cm⁻³)

k_B = constante de Boltzmann = 1.38×10^{-19} cm³ hPa K⁻¹)

Exemplo:

$$p = 1013 \text{ hPa}$$

$$T = 288 \text{ K}$$

$$N = 2.55 \times 10^{19} \text{ molec. cm}^{-3}$$

$$p = 1 \text{ hPa}$$

$$T = 270 \text{ K}$$

$$N = 2.68 \times 10^{16} \text{ molec. cm}^{-3}$$

Lei de Dalton da Pressão Parcial

Pressão total do ar

$$p_a = \sum_q p_q = k_B T \sum_q N_q = N_a k_B T$$

Pressão parcial de cada gás

$$p_q = N_q k_B T$$

Como o vapor é o gás traço mais importante e mais variável

$$p_a = p_d + p_v$$

Concentração em número

$$N_a = N_d + N_v$$

Gás perfeito – ar seco

Pressão Parcial do ar seco(hPa)

$$p_d = \frac{n_d R^* T}{V} = \frac{n_d m_d}{V} \left(\frac{R^*}{m_d} \right) T = \rho_d R' T = \frac{n_d A}{V} \left(\frac{R^*}{A} \right) T = N_d k_B T$$

Densidade do ar seco (g cm⁻³)

$$\rho_d = \frac{n_d m_d}{V}, m_d = 28.97 \text{ g / mol}$$

Concentração em número do ar seco (molec. cm⁻³)

$$N_d = \frac{n_d A}{V}$$

Constante dos gases para o ar seco (Appendix A)

$$R' = \frac{R^*}{m_d} = 287.04 \text{ J / kg / K}$$

Gás perfeito – vapor

Pressão Parcial do ar seco(hPa)

$$p_v = \frac{n_v R^* T}{V} = \frac{n_v m_v}{V} \left(\frac{R^*}{m_v} \right) T = \rho_v R_v T = \frac{n_v A}{V} \left(\frac{R^*}{A} \right) T = N_v k_B T$$

Densidade do ar seco (g cm^{-3})

$$\rho_v = \frac{n_v m_v}{V}, m_v = 18.02 \text{ g / mol}$$

Concentração em número do ar seco (molec. cm^{-3})

$$N_v = \frac{n_v A}{V}$$

Constante dos gases para o ar seco (Appendix A)

$$R_v = \frac{R^*}{m_v} = 461.40 \text{ J / kg / K}$$

Definição de Razão de Mistura

- Em volume (molec. de gás por molec. de ar seco)

$$\chi_q = \frac{N_q}{N_d} = \frac{p_q}{p_d} = \frac{n_q}{n_d}$$

- Em massa (massa de gás por massa de ar seco)

$$\omega_q = \frac{\rho_q}{\rho_d} = \frac{m_q N_q}{m_d N_d} = \frac{m_q p_q}{m_d p_d} = \frac{m_q n_q}{m_d n_d} = \frac{m_q}{m_d} \chi_q$$

Razão de mistura do vapor de água

- Equação de estado para o vapor de água era:

$$p_v = \rho_v R_v T = \rho_v \left(\frac{R_v}{R'} \right) R' T = \frac{\rho_v R' T}{\varepsilon}$$

$$\varepsilon = \frac{R'}{R_v} = \frac{R^*}{m_d} \left(\frac{m_v}{R^*} \right) = \frac{m_v}{m_d} = 0.622$$

- Razão de mistura em massa do vapor de água é então:

$$\omega_v = \frac{\rho_v}{\rho_d} = \frac{m_v p_v}{m_d p_d} = \varepsilon \frac{p_v}{p_d} = \frac{\varepsilon p_v}{p_a - p_v} = \varepsilon \chi_v$$

Umidade Específica

- É uma razão de mistura do ar úmido (razão entre a massa de vapor e a massa total de ar)

$$q_v = \frac{\rho_v}{\rho_a} = \frac{\rho_v}{\rho_d + \rho_v} = \frac{\frac{p_v}{R_v T}}{\frac{p_d}{R' T} + \frac{p_v}{R_v T}} = \frac{\frac{R'}{R_v} p_v}{p_d + \frac{R'}{R_v} p_v} = \frac{\epsilon p_v}{p_d + \epsilon p_v}$$

Equação de estado do ar úmido

Pressão total é dada pela soma:

$$p_a = p_d + p_v = \rho_d R' T + \rho_v R_v T = \rho_a R' T \frac{\rho_d + \rho_v R_v / R'}{\rho_a}$$

Juntando os termos, temos:

$$p_a = \rho_a R' T \frac{\rho_d + \rho_v / \varepsilon}{\rho_d + \rho_v} = \rho_a R' T \frac{1 + \rho_v / (\rho_d \varepsilon)}{1 + \rho_v / \rho_d} = \rho_a R' T \frac{1 + \omega_v / \varepsilon}{1 + \omega_v}$$

E assim podemos escrever a pressão total como:

$$p_a = \rho_a R_m T$$

Onde a constante dos gases para o ar úmido é:

$$R_m = R' \frac{1 + \omega_v / \varepsilon}{1 + \omega_v} = R' \left(1 + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} q_v \right) = R' (1 + 0.608 q_v)$$

Temperatura Virtual

- Assim, a equação de estado para o ar úmido pode ser escrita de duas maneiras:

$$p_a = \rho_a R_m T = \rho_a R' T_v$$

- T_v é a temperatura necessária para o ar seco ter a mesma pressão e densidade do ar úmido.

$$T_v = T \frac{R_m}{R'} = T \frac{1 + \omega_v / \varepsilon}{1 + \omega_v} = T \left(1 + \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} q_v \right) = T (1 + 0.608 q_v)$$

Exemplo

$$p_d = 1013 \text{ hPa}, p_v = 10 \text{ hPa e } T = 298 \text{ K}$$

$$q_v = \frac{\varepsilon p_v}{p_d + \varepsilon p_v} = 0.0061 \text{ kg kg}^{-1}$$

$$m_a = \frac{m_d}{1 + 0.608q_v} = 28.86 \text{ g mol}^{-1}$$

$$R_m = R'(1 + 0.608q_v) = 2.8811 \text{ hPa m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$T_v = T(1 + 0.608q_v) = 299.1 \text{ K}$$

$$\rho_a = \frac{p_a}{R_m T} = 1.19 \text{ kg m}^{-3}$$

Equação Hidrostática

- É a equação de movimento na ausência de aceleração verticais. É dada pelo equilíbrio entre a força gradiente de pressão e a gravidade

$$dp_a = -\rho_a g dz$$

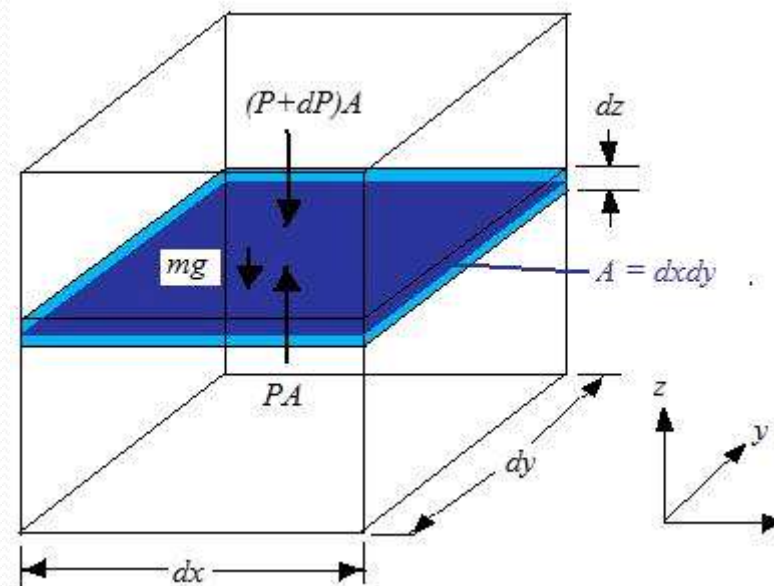
Exemplo

Nível do mar, $p_a = 1013.25 \text{ hPa}$

$$\rho_a = 1.225 \text{ kg m}^{-3}$$

$$g = 9.8072 \text{ m s}^{-2}$$

100 m, $p_{a,100\text{m}} = 1001.24 \text{ hPa}$



Pressão decresce 1 hPa a cada 10 m de altitude

Equações que regem a atmosfera

- Já temos algumas equações:

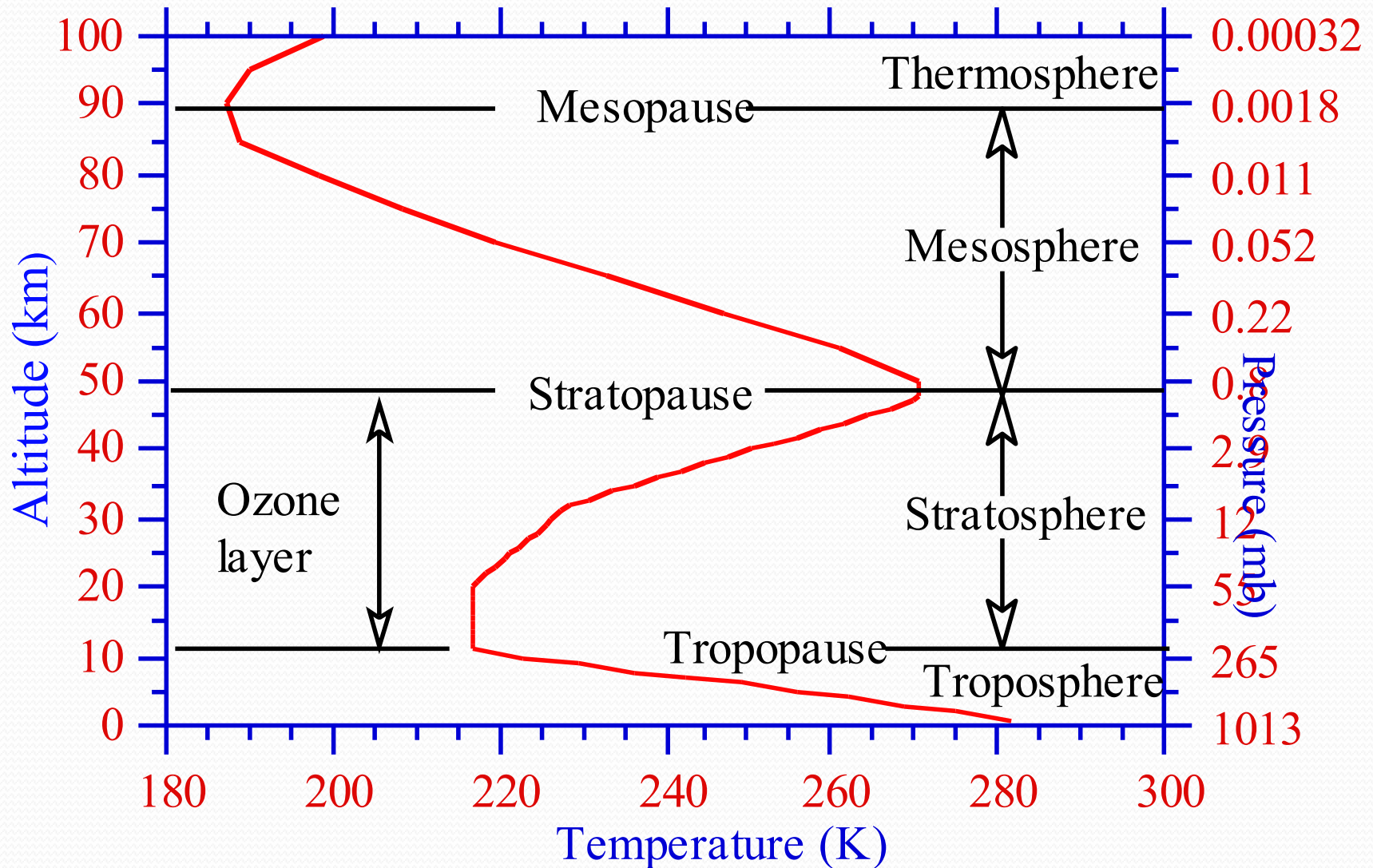
$$dp_a = -\rho_a g dz$$

$$p_a = \rho_a R' T_v$$

$$T_v = T(1 + 0.608 q_v)$$

- Mas ainda faltam mais algumas....

Temperatura x Altitude



Química do Ozônio estratosférico

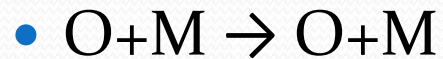
- Fabricação



$$\lambda < 175 \text{ nm}$$



$$175 \text{ nm} < \lambda < 245 \text{ nm}$$



- Destruição



$$\lambda < 310 \text{ nm}$$

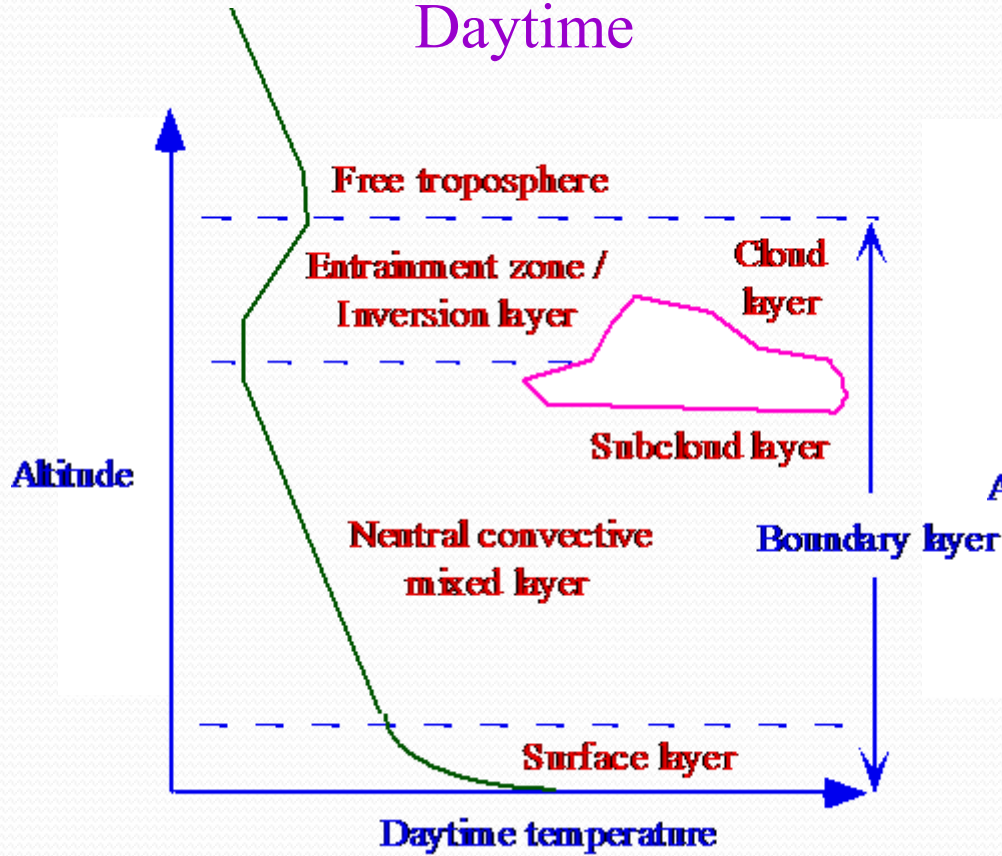


$$\lambda > 310 \text{ nm}$$

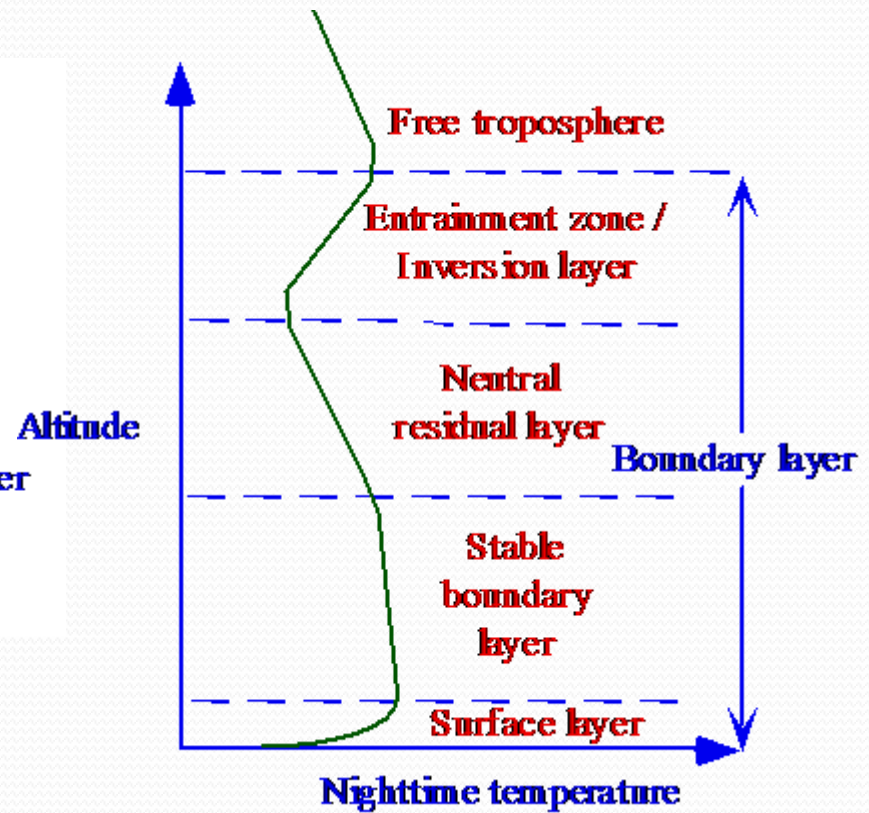


Camada Limite

Daytime



Nighttime



Transferência de Energia

- Condução
 - Transferência de energia entre moléculas
- Convecção
 - Transferência de energia por movimentos verticais de massa em um fluido
- Advecção
 - Transporte horizontal pelo vento médio
- Radiação
 - Transferência de energia pela emissão ou absorção de radiação eletromagnética

Calor sensível

- Calor específico (J / kg / K)
 - É a energia necessária para aumentar em 1K a temperatura de 1kg de uma substância
- Exemplos:
 - 1004.67 for dry air
 - 4185.5 for liquid water
 - 1360 for clay
 - 827 for sand
- Baixo calor específico
- Substância aquece mais rapidamente ao receber calor
- Ex: o solo esquenta mais durante o dia do que a água

Condução

- Só é importante próximo do chão, pois a fluxo de calor por condução ($W\ m^{-2}$)

$$H_c = -k_z \Delta T / \Delta z$$

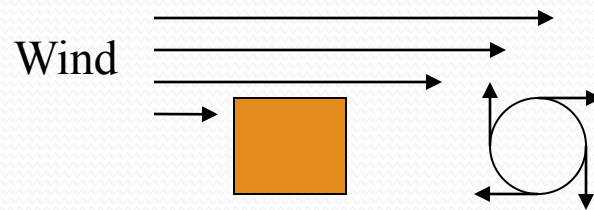
- Onde k_z = condutividade térmica ($W / m / K$)
 - Ar seco = 0.0256
 - Água líquida = 0.6

- Próximo do chão $\frac{\Delta T}{\Delta z} = \frac{-12K}{1mm} \rightarrow H_c = 300W / m^2$

- Troposfera livre $\frac{\Delta T}{\Delta z} = \frac{-6.5K}{1km} \rightarrow H_c = 0.15mW / m^2$

Turbulência

- É o movimento caótico do vento devido a interação aos vórtices de vários tamanhos

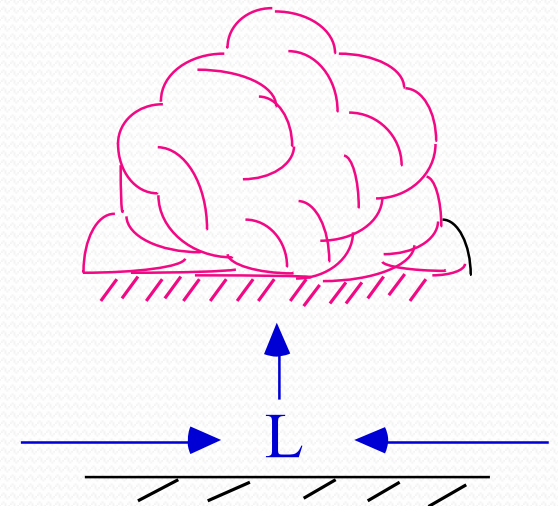
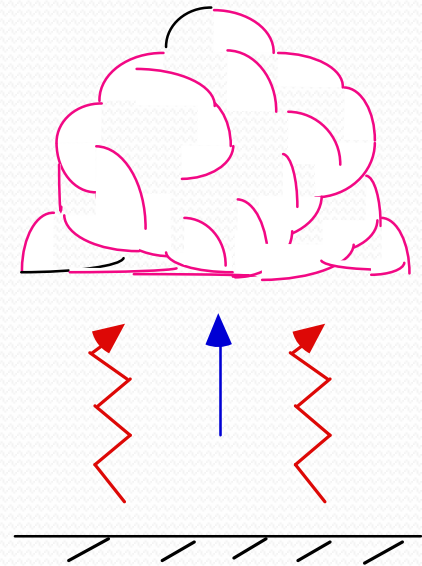


- Turbulência térmica: turbulência devido a flutuação de uma parcela quente em meio ao ar frio
- Turbulência mecânica: turbulência devido ao cisalhamento, convergência ou divergência do vento

Convection

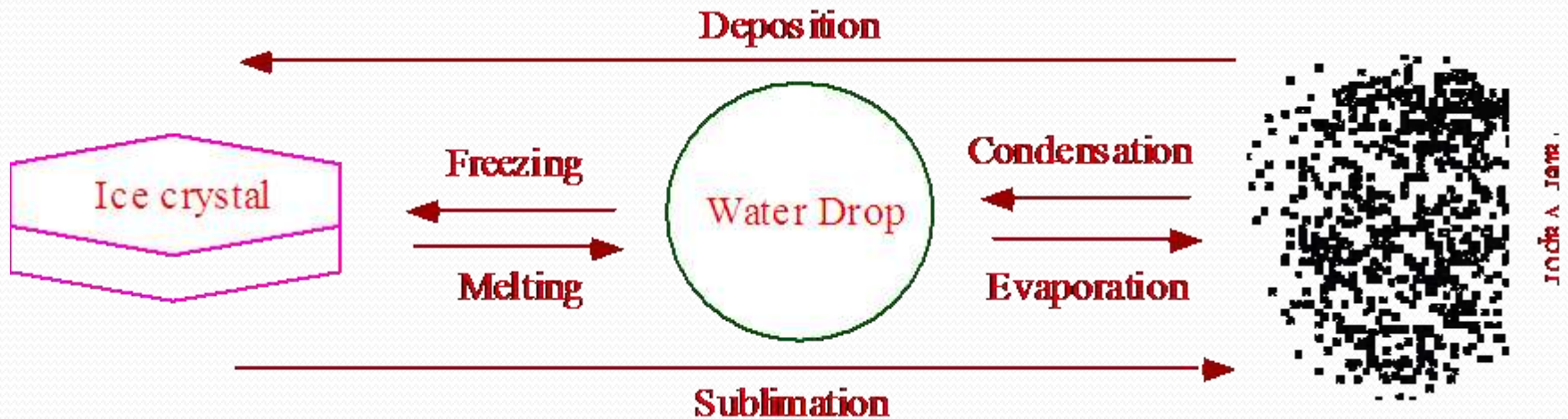
Movimento vertical do ar

- **Livre:** movimento vertical devido a turbulência térmica
- **Forçada:** movimento vertical devido a turbulência mecânica



Calor Latente

- É a energia necessária para uma substância mudar de fase



- Condensação, congelamento, deposição
 - Liberam energia e esquentam o ar
- Evaporação, fusão, sublimação
 - absorvem energia e esfriam o ar

Calor latente

- O calor latente é a diferença de entalpia ($h=c_p T + cte$) entre os dois estados, assim, sua variação com a temperatura é dada por:

$$\frac{dL_e}{dT} = c_{p,v} - c_w$$

- Integrando

$$L_e = L_{e,0} - (c_w - c_{p,v})(T - T_0)$$

- Substituindo as constantes ($J \text{ kg}^{-1}$)

$$L_e \approx 2.501 \times 10^6 - 2370 T_c$$

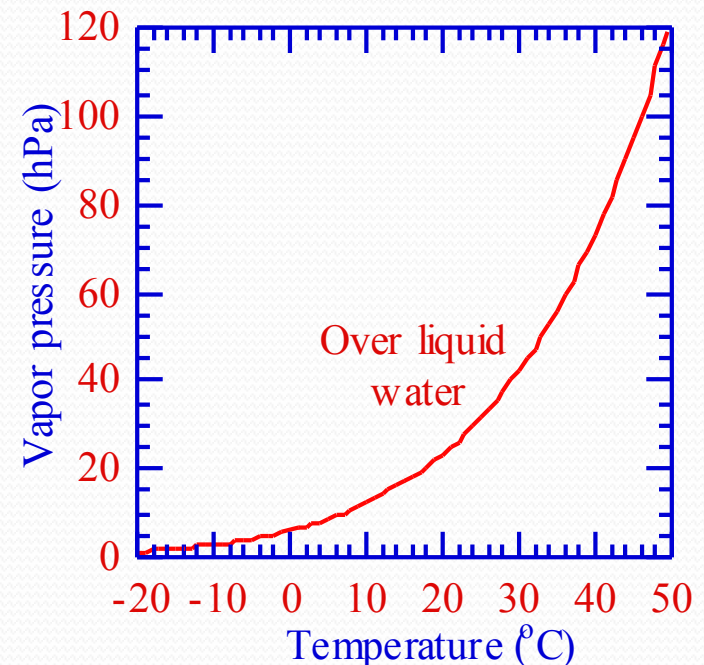
Equação de Clausius-Clapeyron

- A pressão de vapor de saturação varia com a temperatura:

$$\frac{dp_{v,s}}{dT} = \frac{\rho_{v,s}}{T} L_e$$

- E podemos encontrar uma expressão para ela:

$$p_{v,s} = 6.112 \exp\left(\frac{17.67T_c}{T_c + 243.5}\right)$$

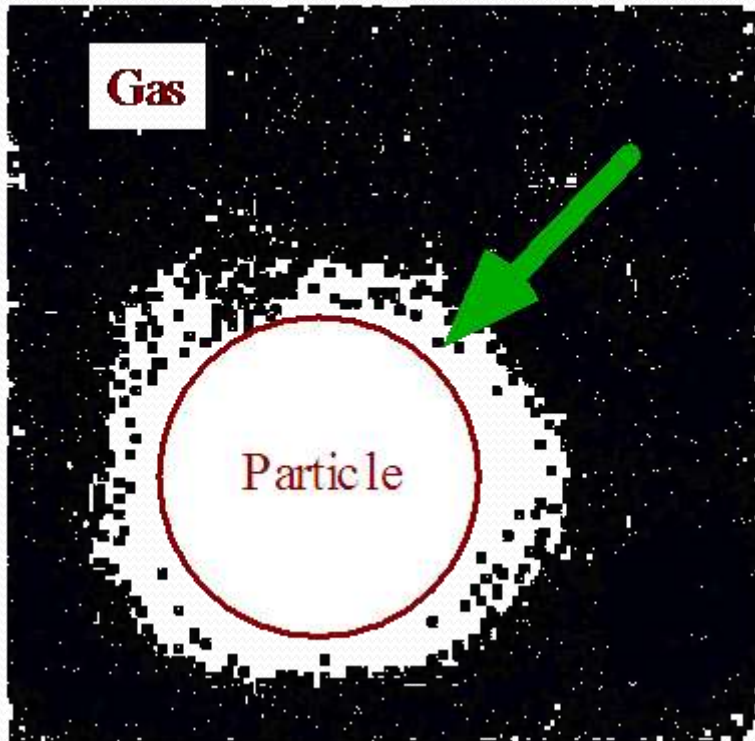


Condensação/Evaporação

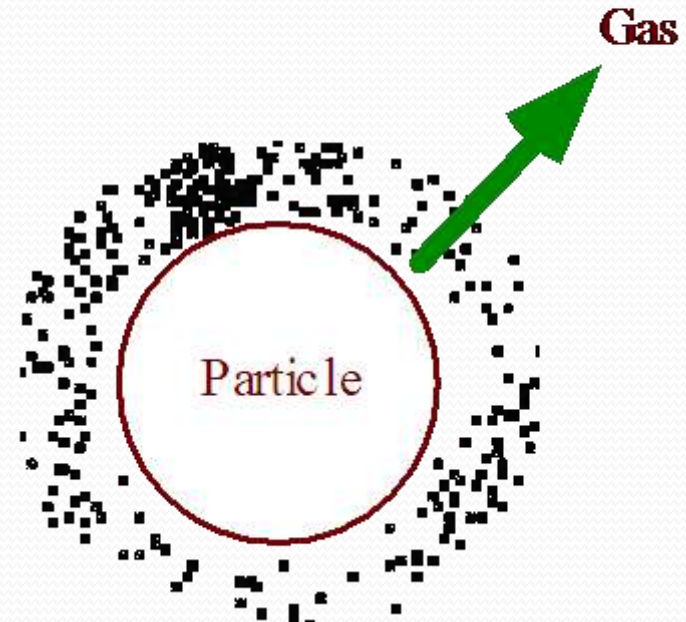
Condensação para $p_v > p_{v,s}$

Evaporação para $p_v < p_{v,s}$

Condensation

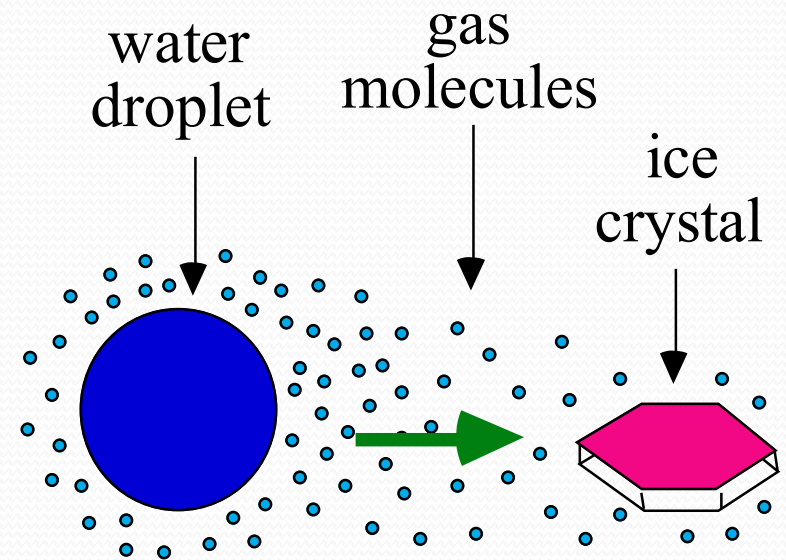
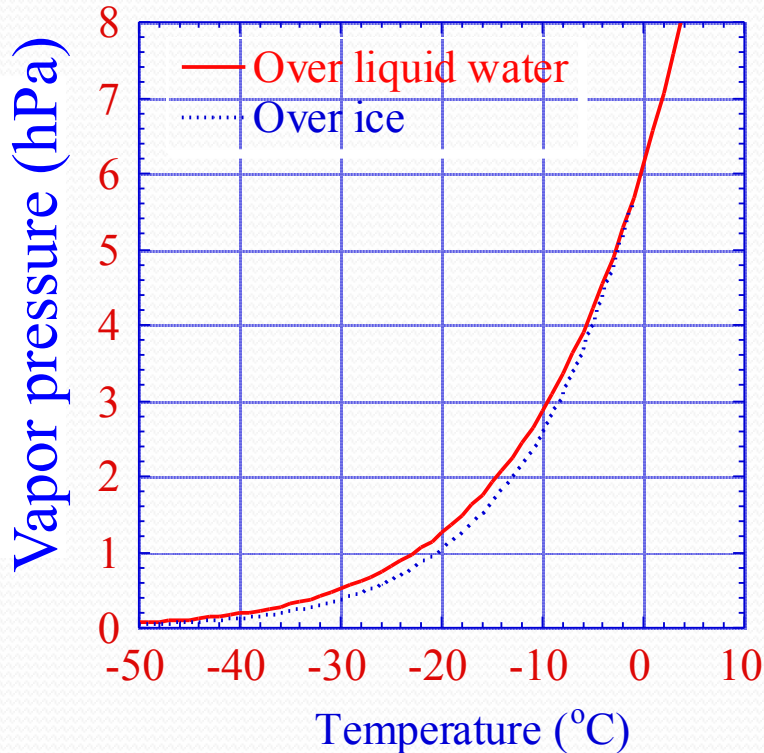


Evaporation



Formation of Rain in Cold Clouds

Ice Crystal (Bergeron) Process



- $p_{v,s}$ sobre gelo é menor que sobre água
- As gotas evaporam e o vapor flui para os cristais

1a lei da termodinâmica

- A primeira lei da termodinâmica pode ser escrita para a atmosfera como:

$$dQ = c_{v,m} dT + p_a d\alpha_a \quad \alpha_a = 1/\rho_a$$

- Que pode ser reescrita como:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{c_m^p} \frac{dQ}{dt} + \frac{1}{c_m^p \rho_a} \frac{dP_a}{dt}$$

- O problema é que c_m^p depende de T e q

1a lei da termodinâmica

- Não vamos mostrar toda a dedução, mas podemos definir uma temperatura potencial virtual

$$\theta_v = T_v \left(\frac{1000 \text{hPa}}{p_a} \right)^\kappa$$

- Que já inclui a variação com a pressão e finalmente escrever a equação resolvida pelos modelos

$$\frac{d\theta_v}{dt} = \frac{1}{c_p^d} \frac{\theta_v}{T_v} \frac{dQ}{dt}$$

Equações que regem a atmosfera

$$dp_a = -\rho_a g dz$$

$$T_v = T(1 + 0.608q_v)$$

$$p_a = \rho_a R' T_v$$

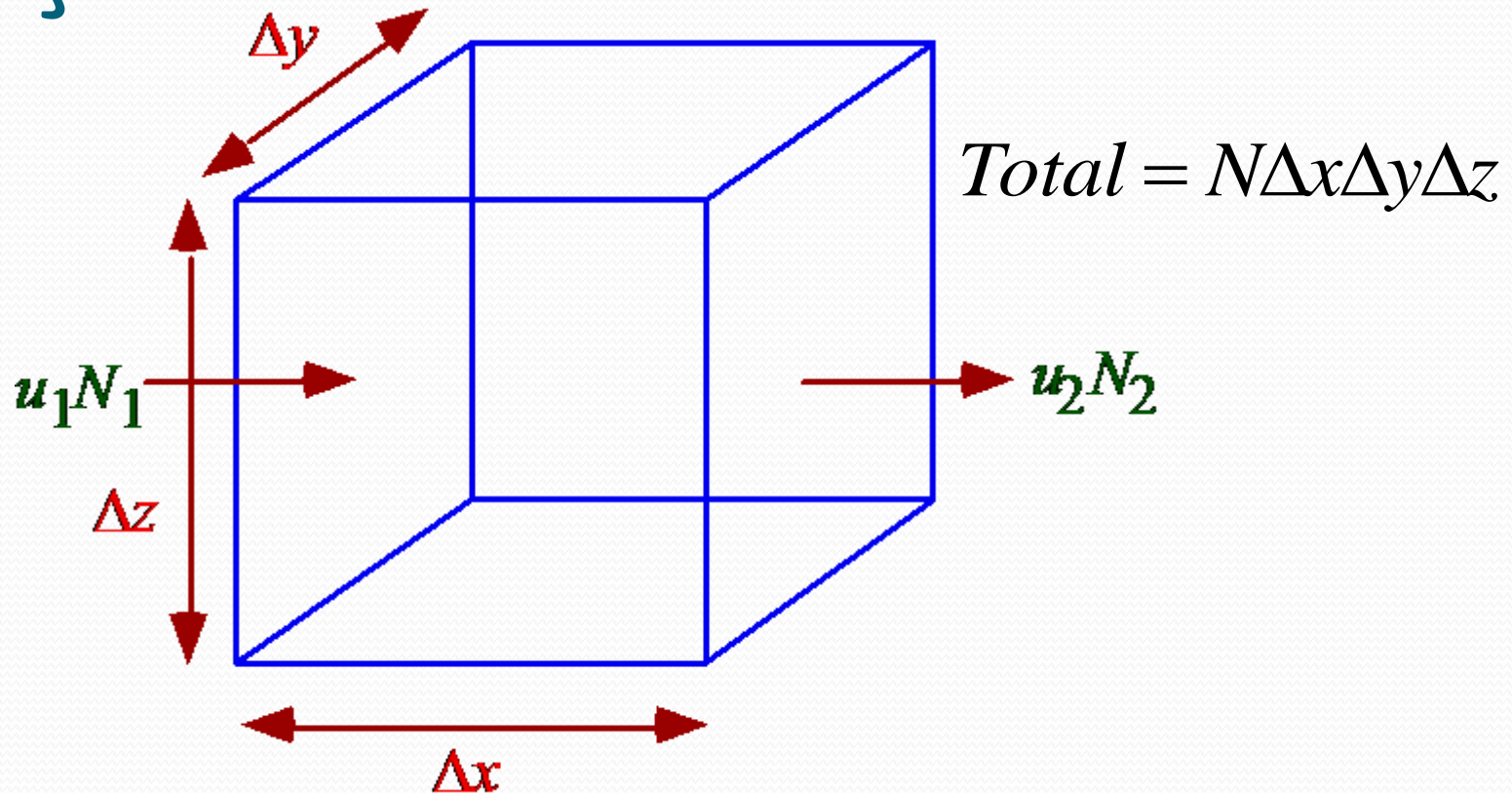
$$\theta_v = T_v \left(\frac{1000 \text{hPa}}{p_a} \right)^\kappa$$

$$\frac{d\theta_v}{dt} = \frac{1}{c_p^d} \frac{\theta_v}{T_v} \frac{dQ}{dt}$$

Também não vamos entrar em detalhes, mas a equação de conservação de momento leva a equação de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} + \nu \nabla^2 \mathbf{V} - \frac{\nabla P}{\rho} + \mathbf{g}$$

Equação da continuidade



Considerando apenas a direção x, temos:

$$\Delta N\Delta x\Delta y\Delta z = u_1 N_1 \Delta y\Delta z\Delta t - u_2 N_2 \Delta y\Delta z\Delta t$$

Equação da continuidade

Dividindo os dois lados por Δt e pelo volume ($\Delta x \Delta y \Delta z$)

$$\frac{\Delta N}{\Delta t} = - \left(\frac{u_2 N_2 - u_1 N_1}{\Delta x} \right)$$

E tomando o limite para $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$, encontramos

$$\frac{\partial N}{\partial t} = - \frac{\partial (uN)}{\partial x}$$

Que pode ser generalizado para escrever a equação de conservação na forma de divergência do fluxo

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{V}N)$$

Similar a conservação de carga elétrica

Equação da continuidade

Como a massa de cada molécula não muda

$$\rho = \frac{Nm}{N_A} \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{V})$$

Usando a regra da cadeia

$$\nabla \cdot (\mathbf{v} \rho) = \rho (\nabla \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \rho$$

Dá definição de derivada total:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho$$

Transporte do
gradiente

Substituindo, chegamos a forma da divergência da velocidade:

Lagrangiano

$\frac{d}{dt}$

$\rho(\mathbf{v})$

Euleriano

$\frac{d}{dt}$

$\rho_a (\nabla \cdot \mathbf{v})$

Continuidade da umidade específica

A umidade específica é dada por

$$\rho_v = q_v \rho_{ar}$$

Substituindo na equação da continuidade, temos:

$$\partial(q\rho_a) / \partial t = -\nabla \cdot (\mathbf{v}q\rho_a)$$

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

Assim a equação para a umidade específica fica:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla q \Rightarrow \frac{dq}{dt} = 0$$

Detalhes

- Assumimos que o fluxo era dado pelo (Vento * N), mas também há um fluxo devido a difusão molecular.
- Pela lei de Fick:

$$\mathbf{F}\psi = -D\nabla\psi$$

$$D \approx 0.2 \text{ cm}^2/\text{s}$$

- Onde D é o coeficiente de difusão molecular.
- Também esquecemos das fontes e sumidouros.
Considerando tudo junto, temos:

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

Para o vapor de água

- Na troposfera e na estratosfera, o termo de difusão é desprezível pois o livre caminho médio das moléculas é muito pequeno.

Mov. Browniano
(Einstein)

$$\Delta t = \frac{\Delta x^2}{2D} = \frac{(1m)^2}{2 \cdot 0.2cm^2 / s} \approx 30dias$$

- Assim:

$$\frac{dq}{dt} = F - S$$

- A forma lagrangeana (d/dt) muito simples é o que está nas bases dos modelos de parcela.

Conservação

- A equação de conservação de massa é semelhante a conservação de momento:

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

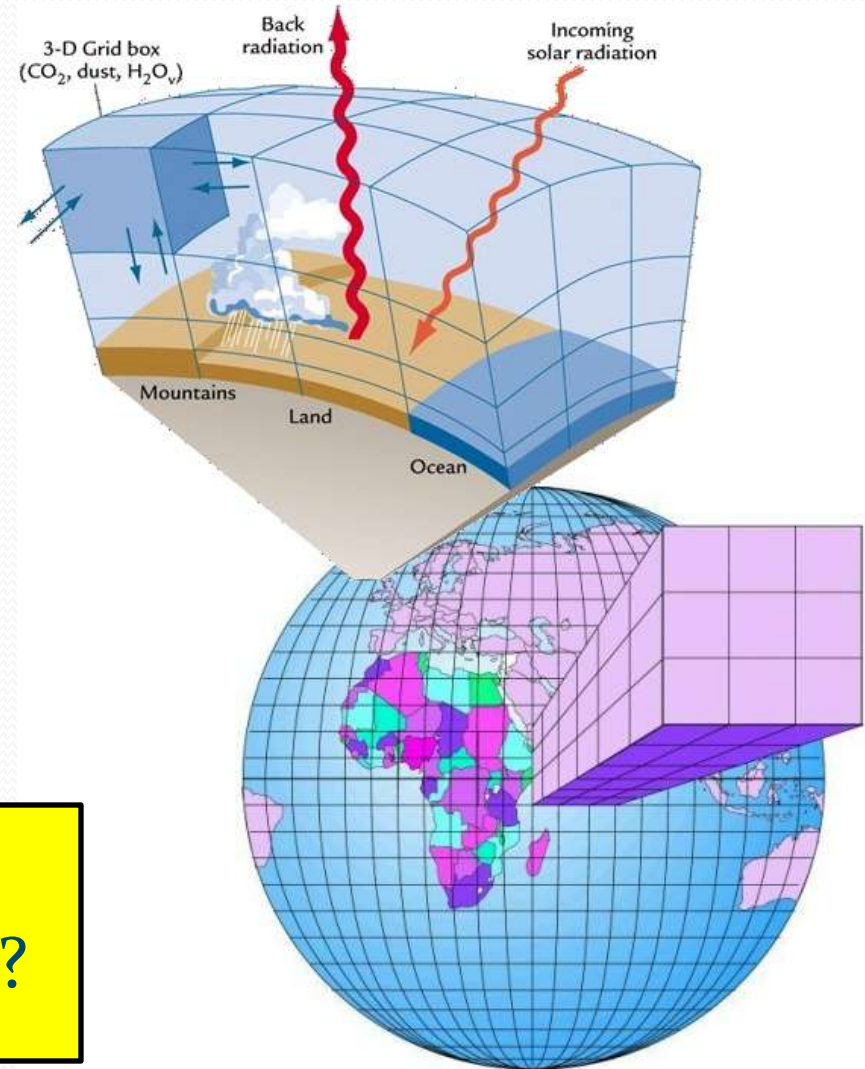
$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla q + D_q \nabla^2 q + F_q - S_q$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nu \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{\nabla P}{\rho} + \mathbf{g}$$

Fontes e sumidouros de momento: 2ª lei de Newton

Como resolver as eq. da atmos.?

- São leis de conservação da física.
- São equações diferenciais e representam uma conservação local!
- São contínuas e válidas em todos os pontos do espaço físico (x,y,z,t)



O que acontece quando discretizamos as equações?