



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Exploración numérica sobre el impacto del
exceso de núcleos de condensación en la
cantidad de lluvia

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Licenciado en Ciencias de la Tierra

PRESENTA:

Olmo Guerrero Medina

TUTOR

Dr. Gerardo Hernández Dueñas



Querétaro, Junio 2017



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Resumen

Las emisiones antropogénicas de aerosoles han aumentado drásticamente desde la revolución industrial. Se ha planteado que la contaminación (al aumentar el número de partículas) incrementa la cantidad de núcleos de condensación de nube (NCN) que hay en la atmósfera. Esto puede alterar la concentración y el tamaño de las gotitas, dado que la misma cantidad de vapor de agua debe ser repartida entre una mayor cantidad de NCN. Si las gotitas son pequeñas los procesos de formación de lluvia son poco eficientes y la cantidad de lluvia puede modificarse. A lo largo del trabajo se analiza el impacto del exceso de aerosoles en la tasa de precipitación, utilizando un modelo (preexistente) mínimo 3-D de dinámica atmosférica y auto-conversión rápida entre las fases gaseosa y líquida del agua. El presente trabajo aporta la parametrización de la microfísica de los NCN y su rol en los cambios de fase. El esquema numérico utilizado para resolver el modelo ha mostrado ser estable para flujos turbulentos. Consta de una descomposición pseudo-espectral en la dirección horizontal, diferencias finitas en la dirección vertical e integración temporal empleando Runge-Kutta de tercer orden. Numéricamente los procesos internos de las nubes no son resueltos. Se presentan escenarios con distintas condiciones iniciales de abundancia, eficiencia y altura de la capa de NCN. Adicionalmente se repitieron estos casos con presencia (o ausencia) de cizalla ambiental. Los resultados numéricos muestran que el exceso de NCN eficientes propicia un retraso en el inicio de la lluvia, sin importar la altura inicial de la capa de NCN. La lluvia es inhibida en los casos con NCN poco eficientes y presencia de cizalla ambiental, sin importar la altura y concentración inicial de la capa.

Agradecimientos

Guardo un profundo agradecimiento a mis padres, Hortencia Medina U. y Antonio Guerrero H., mis primeros maestros, cuyo amor, comprensión y apoyo han sido las semillas, el agua y el sol de este árbol. Este trabajo está dedicado a ustedes.

Me gustaría agradecer a la Dra. Dara Salcedo por haberme guiado, apoyado y motivado en distintas etapas de la licenciatura y en el camino enseñarme el oficio científico, al Dr. Gerardo Hernández por enseñarme el proceso creativo de investigación con discusiones de las cuales siempre salía confundido pero ansioso de aclarar mis ideas y al Dr. Adolfo Magaldi por contagiarme el gusto por las ciencias atmosféricas, por su ayuda en el desarrollo de mis habilidades de programación y por siempre animarme. Este trabajo debe mucho a María Erandi Flores, Pablo Gómez, Fabricio Sánchez, Ángel Tinoco y Alejandro Castillo, pues sin conocer el tema siempre escucharon las ideas que a la mitad de la comida o del paseo se me ocurrían y se emocionaron conmigo en todas las etapas de la tesis, además de proveerme la compañía y el amor necesario para vivir contento. Finalmente me gustaría agradecer a Frédéric-Yves Jeannet por haberme apoyado durante mi estancia en la Ciudad de México y por sus diversas enseñanzas, que no son evidentes en este trabajo pero están.

A todos: gracias por su generosidad.

Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM UNAM-DGAPA-PAPIIT IA103015 y UNAM-DGAPA-PAPIIT IA104517. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida.

Índice general

Resumen	I
Agradecimientos	II
Antecedentes	1
1.1. Precipitación y núcleos de condensación de nube	1
1.1.1. Formación de precipitación	1
1.1.1.1. Formación de gotitas de nube	2
1.1.1.2. Formación de gotas de lluvia caliente	3
1.1.2. Aerosoles atmosféricos	4
1.1.2.1. Núcleos de condensación de nube	5
1.1.3. Efectos del exceso de núcleos de condensación de nube en la precipitación	6
1.1.3.1. Supresión y exceso de precipitación	7
1.2. Modelo mínimo de convección atmosférica	8
1.2.1. Modelo mínimo de auto-conversión rápida	9
1.3. Derivación del modelo	10
1.3.1. Conservación de la masa	11
1.3.1.1. Aproximación de Boussinesq para la ecuación de continuidad	12
1.3.2. Balance de momento	13
1.3.2.1. Campos de velocidad y aceleración del fluido	13
1.3.2.2. Fuerzas que actúan sobre la parcela	13
1.3.2.3. Derivación de la fuerza de flotación	15
1.3.2.4. Ecuación de balance de momento	17
1.3.3. Temperatura Potencial	17
1.3.4. Conservación del agua	19

1.3.4.1.	Conservación del agua líquida	19
1.3.4.2.	Conservación del vapor de agua	20
1.3.4.3.	Parametrización de los cambios de fase	20
Descripción de los núcleos de condensación de nube en el modelo		22
2.1.	Ecuación para la capa de núcleos de condensación de nube	22
2.2.	Parametrización del rol de los núcleos de condensación de nube en la formación de agua de lluvia	23
Esquema numérico		25
3.1.	Transformada discreta de Fourier	25
3.1.1.	Error de aliasing	26
3.1.2.	Eliminación del error de aliasing	27
3.1.3.	FFTW	28
3.2.	Runge-Kutta de orden 3	30
3.2.1.	Error de truncamiento	30
3.3.	Esquema numérico incompresible	31
3.3.1.	Esquema numérico incompresible	31
3.3.2.	Método de Thomas para matrices tri-diagonales	35
3.3.3.	Adimensionalización de las ecuaciones	36
3.3.3.1.	Escalas y variables adimensionales	36
3.3.3.2.	Ecuaciones adimensionales	37
Resultados y discusión		38
4.1.	Condiciones iniciales	38
4.2.	Casos con núcleos de condensación de nube eficientes	40
4.2.1.	Casos sin cizalla ambiental	40
4.2.1.1.	Conclusiones	44
4.2.2.	Casos con cizalla ambiental	45
4.2.2.1.	Conclusiones	48
4.3.	Casos con núcleos de condensación de nube poco eficientes	49
4.3.1.	Casos sin cizalla ambiental	49
4.3.1.1.	Conclusiones	51
4.3.2.	Casos con cizalla ambiental	52
4.3.2.1.	Conclusiones	54
4.4.	Conclusiones Generales	55

Bibliografía	58
Apéndice A	60
6.1. Expansión en series de Taylor del esquema numérico	60

Índice de figuras

1.1. Cambio de la energía libre de Gibbs de la nucleación de una gotita en función de su radio.	2
1.2. Dibujo esquemático del crecimiento de aerosol a gotita por agregación de vapor	6
1.3. Dibujo esquemático del aumento de gotas debido al exceso de NCN	7
1.4. Perfil vertical de saturación	21
2.5. Velocidad terminal de los NCN en función de q_r	23
2.6. Relación entre τ_c^{-1} y la eficiencia de los NCN	24
3.7. Malla escalonada	33
4.8. Altura y abundancia iniciales de la capa de NCN	39
4.9. Figura 3-D de los NCN y Q_r en la primera hora del caso B	40
4.10. Promedio temporal de q_r para los cuatro casos	41
4.11. Máximos temporales de q_r para los cuatro casos sin cizalla	42
4.12. Máximos temporales de q_v para los cuatro casos sin cizalla	43
4.13. Máximos temporales de los NCN para los cuatro casos sin cizalla	44
4.14. Promedio temporal de q_r para los cuatro casos con cizalla	45
4.15. Máximos temporales de q_r para los cuatro casos con cizalla	46
4.16. Máximos temporales de q_v para los cuatro casos con cizalla	47
4.17. Máximos temporales de los NCN para los cuatro casos con cizalla	48
4.18. Promedio temporal de q_r para los cuatro casos sin cizalla y NCN poco eficientes	49
4.19. Máximos temporales y comportamiento vertical de q_r para los cuatro casos sin cizalla y NCN poco eficientes en el centro horizontal del dominio	50
4.20. Máximos temporales de q_v para los cuatro casos sin cizalla y NCN poco eficientes	51

4.21. Máximos temporales de los NCN para los cuatro casos sin cizalla y NCN poco eficientes	52
4.22. Promedio temporal de q_r para los cuatro casos con cizalla y NCN poco eficientes	53
4.23. Máximos temporales de q_r para los cuatro casos con cizalla y NCN poco eficientes	54
4.24. Máximos temporales de q_v para los cuatro casos con cizalla y NCN poco eficientes	55
4.25. Máximos temporales de NCN para los cuatro casos con cizalla y NCN poco eficientes	56

Antecedentes

1.1. Precipitación y núcleos de condensación de nube

En la Tierra se presentan condiciones de presión y temperatura que permiten la coexistencia de las tres fases del agua. Dependiendo de la altura y de las condiciones de saturación, el vapor de agua se transforma en agua líquida o en agua sólida (granizo, graupel, etc.). Cuando los hidrometeoros caen se les denomina precipitación y, si alcanzan la superficie, lluvia (13). Aunque la definición formal incluye gotas, cristales de hielo, granizo, etcétera, a lo largo de este trabajo solo se hará referencia al agua líquida o de lluvia. Lo anterior con el objetivo de mantener una descripción mínima de la microfísica y la dinámica atmosférica. De manera similar, se utilizará el término *gotita* para las partículas de nube y *gota* para las partículas de precipitación.

1.1.1. Formación de precipitación

La precipitación es un fenómeno resultado de diversas causas, con componentes microfísicas, dinámicas (de pequeña y gran escala), radiativas, orográficas, entre otras. Las distintas interacciones entre ellas propician diferentes tipos de nubes y de precipitación. Termodinámicamente hablando, las nubes se desarrollan a costa de su energía interna. Los cambios de fase liberan calor latente, que en la atmósfera se utiliza como energía para promover o inhibir la convección. Rosenfeld *et al.* (14) mencionan que aproximadamente 37 % de la entrada de energía a la troposfera (la capa de la atmósfera más cercana a la superficie) se debe al calor latente liberado.

Cuando en la atmósfera existen condiciones propicias para la convección, el va-

por asciende. Si éste alcanza regiones donde satura (localmente) a la atmósfera, se forman pequeñas gotitas de agua. Éstas conforman las nubes y se encuentran en continuo movimiento, interacción (entre ellas y con su ambiente) y suspendidas por fuerza de arrastre. El rango de tamaños de gotita de nube es de $10\mu m$ a $100\mu m$ de radio (13). Las colisiones entre gotitas favorecen el crecimiento de las mismas al coleccionar gotitas más pequeñas. Si las gotitas crecen lo suficiente para vencer la fuerza que las mantiene suspendidas, precipitan. A esta forma de precipitación se le denomina lluvia caliente. En contraparte, la lluvia fría involucra la coexistencia de las tres fases del agua y los posibles cambios de fase involucrados. En dicho mecanismo el derretimiento y fraccionamiento de cristales se adiciona a la colisión y coalescencia de las gotas, haciendo más eficiente el crecimiento. Ambos procesos conllevan interacciones entre la microfísica (cambios de fase) y la dinámica atmosférica que no suceden de forma aislada. Sin embargo la descripción (necesariamente detallada) de las distintas formas de agua sólida sale de la motivación de este trabajo. Por tanto este trabajo y sus conclusiones quedan delimitadas en el proceso de lluvia caliente.

1.1.1.1. Formación de gotitas de nube

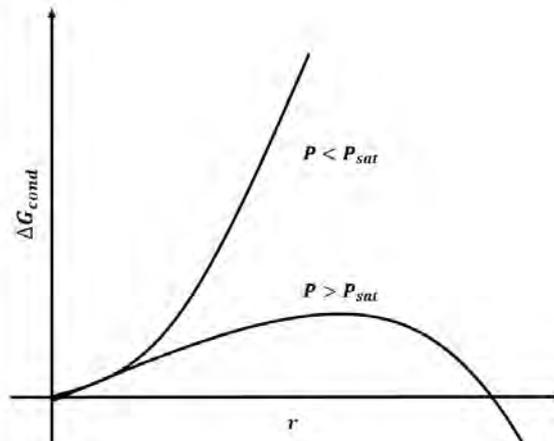


Figura 1.1: Cambio de la energía libre de Gibbs de la nucleación de una gotita en función de su radio..

La nucleación es la etapa inicial en el proceso de cambio de fase vapor-líquido y se expresa:

$$\Delta G_{cond} = 4\pi r^2 \gamma - \frac{4}{3} r^3 \frac{\rho}{M} RT \ln \left(\frac{P}{P_{sat}} \right) \quad (1.1)$$

donde el cambio en la energía libre de Gibbs está representado por (ΔG), r denota el radio de la gotita, γ la tensión superficial en la interfaz vapor-líquido, M la masa molar relativa, ρ la densidad del líquido; y la constante del vapor de agua y su temperatura están expresadas por R y T respectivamente. El primer término de la ecuación describe los efectos de curvatura de la gotita. La figura 1.1 muestra la energía libre de Gibbs del proceso de nucleación de una gotita en función de su radio. Cuando $\Delta G > 0$ la presión de vapor (P) sobre la superficie es menor que la presión de saturación (P_{sat}). Lo anterior se traduce en que la gotita no es estable y por tanto se evapora. Para que una gotita sea estable debe de cumplir el criterio de espontaneidad, $\Delta G < 0$. Esto se logra si la gotita alcanza un radio crítico (r_c), el cual hace que la presión en la superficie de la gotita sea mayor que la presión de vapor de saturación. En este proceso de nucleación homogénea la gotita crece a costa de minimizar su potencial químico (ΔG molar). Cuando la gotita alcanza r_c se dice que está activada. De manera formal, en la jerga de la física de nubes, una gotita se considera gotita de nube si y solo si ha excedido su radio crítico (15), pues esto garantiza la estabilidad de la gotita. A la nucleación anteriormente descrita se le denomina nucleación homogénea, pues en ella participa una sola sustancia. La sobresaturación es la condición para que ocurra la transición de fase. La sobresaturación necesaria para que la nucleación homogénea ocurra es mucho mayor que la que ocurre en la atmósfera (15). En la atmósfera terrestre no se observan valores de sobresaturación mayores al 1%. Por lo tanto, la nucleación es heterogénea, promovida por partículas suspendidas en la atmósfera y solubles en agua. Inicialmente la superficie de estas partículas sirve como catalizador para promover el cambio de fase de vapor a líquido. Posteriormente, se disuelve en la gota y disminuye la presión de saturación, haciendo que la gota pueda alcanzar y superar r_c . Estas partículas se conocen como núcleos de condensación de nube. Las gotitas formadas mediante condensación de vapor son muy pequeñas ($\approx 10 \mu\text{m}$) pero ya conforman una nube.

1.1.1.2. Formación de gotas de lluvia caliente

Una vez que una gota está activada, continua su crecimiento por agregación de vapor, sin embargo este proceso no es responsable de generar gotas de precipitación. Los tamaños típicos de una gotita de nube, una gotita grande de nube y una gota de lluvia son: $10 \mu\text{m}$, $50 \mu\text{m}$ y $1000 \mu\text{m}$ respectivamente (13). Los procesos que permiten que la gotita crezca son la colisión y la coalescencia. Sin embargo

estos procesos requieren que algunas gotitas crezcan hasta obtener radios de $\approx 18\mu\text{m}$ ((13). Aún existen preguntas abiertas sobre los mecanismos por los cuales se da la diversificación de tamaños de una población de gotitas, pero la necesidad de esta no está en duda. La colisión se da entre dos gotas que se encuentran y chocan, el proceso no siempre termina con una gota más grande (coalescencia), puede ocurrir fragmentación. Para que el proceso de colisión-coalescencia sea eficiente es necesario que una gotita grande barra a una gotita de menor tamaño, cuando las gotitas son del mismo tamaño (o similar) la colisión es menos eficiente. Una vez que estos procesos son eficientes, hay una mayor diversificación de los tamaños de la población de gotitas, aumentado la eficiencia de ambos procesos. Cuando las gotitas crecen lo suficiente para vencer las fuerzas que las mantienen suspendidas, precipitan. La precipitación que durante su caída no se evapora y alcanza la superficie se conoce como lluvia.

1.1.2. Aerosoles atmosféricos

A las partículas líquidas o sólidas suspendidas en la atmósfera se les denomina aerosoles, aunque de manera estricta el término aerosol incluye tanto a las partículas como al fluido que las contiene, la comunidad de las ciencias atmosféricas utiliza el término aerosol solo para hacer referencia a la partícula. Donde la partícula es una unidad continua (con dimensiones mayores a $0.001\ \mu\text{m}$) parcial o totalmente compuesta de líquido o sólido, constituida por la unión de muchas partículas (15). Brock (citado en (13)) menciona que el 75% de los aerosoles atmosféricos son emitidos directamente a la atmósfera y el 25% restante son producidos en ella, mediante el proceso de conversión gas-partícula. Sin importar su origen, los aerosoles continuamente tienen transformaciones químicas y físicas, sufren sedimentación, advección, mezclado y pueden ser retiradas de la atmósfera de forma seca o de forma húmeda (formando parte o barridas por una gota). Para su estudio los aerosoles pueden ser clasificados de maneras distintas, ya sea por su tamaño, sus propiedades ópticas o aerodinámicas, por su composición química, o por su capacidad de participar en los procesos de formación de nubes y precipitación. Esta última clasificación es la utilizada en este trabajo y se explica a continuación.

Como se menciona en la sección 1.1.1.1 para que la transición de fase ocurra

a condiciones realistas (de la atmósfera terrestre) es necesaria la presencia de núcleos que faciliten la estabilidad de la gotita. Dentro de los aerosoles se encuentran tres subconjuntos importantes de estas partículas: los núcleos de condensación (NC), los núcleos de hielo (NI) y los núcleos de condensación de nube (NCN). Los NC son partículas formadas en la atmósfera por procesos de condensación de vapores calientes emitidos a la atmósfera y por nucleación de especies atmosféricas, por ejemplo el nitrato y el sulfato de amonio. Los NI son partículas que sirven como núcleos para la formación de partículas de hielo. En ausencia de NI las partículas de hielo pueden formarse a temperaturas por debajo de -40°C ((13) y Hobbs citado en (15)), sin embargo por la presencia de NI en la atmósfera, ocurre a temperaturas mayores. Los NCN son partículas que pueden activarse (superar r_c) y crecer a gotitas de nube bajo las condiciones de sobresaturación de la atmósfera terrestre. Los núcleos de condensación de nube representan la porción de NC que pueden formar gotitas; dado que cada NCN activa una gotita, la concentración en número de NCN corresponde a la concentración en número de gotitas. Los aerosoles que funcionan como NI son distintos a los NCN, usualmente los NI son insolubles en agua, mientras que la solubilidad de los NCN es un factor determinante en la formación de gotitas, dado que la presión de saturación de una sustancia impura es menor en comparación de una pura y esto ayuda a contrarrestar los efectos de curvatura de la gotita. Las partículas provenientes de la erosión del suelo, principalmente las arcillas, son buenos NI, debido a la similitud cristalográfica de ambos cristales (el de hielo y el del mineral que compone la arcilla).

1.1.2.1. Núcleos de condensación de nube

Como se mencionó en la sección anterior los núcleos de condensación de nube son la porción de los NC que son capaces de activarse. La capacidad y el número de partículas de una población de NC de convertirse en NCN depende de su tamaño, de su composición química y de la sobresaturación ambiental. El tamaño determina la facilidad en que alcanzará el radio crítico, partículas con radios menores a $0.1\ \mu\text{m}$ requerirían una sobresaturación muy grande para activarse (13). Se considera que el tamaño mínimo de un NCN capaz de activarse es de $0.1\ \mu\text{m}$, pues partículas con radios mayores requieren condiciones de sobresaturación mayores al 1% (15). El grado de afinidad por el agua se debe a su identidad química, que a su vez se encuentra relacionada a su origen. La afinidad de un NCN por el

agua es función de la humedad ambiental. Por tanto un NC es (o no) un NCN dependiendo de la sobresaturación ambiental. La vida promedio de un NCN es de aproximadamente una semana y en este tiempo experimenta entre 5 y 10 veces el ciclo de activación-nube-precipitación antes de ser removido de la atmósfera (15).

Como se esquematiza en la figura 1.2, un NCN crece, antes y después de activarse, por difusión de moléculas de vapor hacia su superficie, aproximadamente hasta alcanzar un radio de $10\ \mu m$. El crecimiento desde este radio hasta $1000\ \mu m$ (tamaño típico de una gota de lluvia) se da por el proceso de colisión y coalescencia explicado anteriormente.

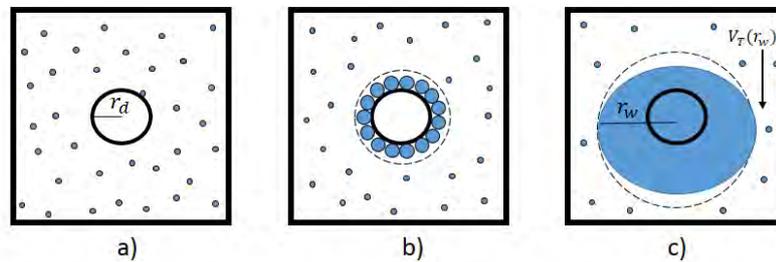


Figura 1.2: Dibujo esquemático de un NCN de radio r_d inmerso en vapor de agua (círculos azules) cercano a la saturación. En a) el NCN aún no ha absorbido agua. En b) el agua condensa alrededor del NCN y comienza a formar una gotita, incrementado su radio hasta r_w . Si la gotita crece lo suficiente entonces alcanza su velocidad terminal (V_T) y precipita, como se muestra en c).

1.1.3. Efectos del exceso de núcleos de condensación de nube en la precipitación

Las emisiones antropogénicas de aerosoles han aumentado drásticamente desde la revolución industrial. Los efectos de este aumento se hacen evidentes en la salud humana y en el sistema climático a través de la reducción de visibilidad, deposición ácida y alteración del balance radiativo de la Tierra. (15).

Twomey (17) propuso que la contaminación (al aumentar el número de partículas) aumenta la cantidad de NCN que hay en la atmósfera, propiciando mayor activación. Lo anterior aumenta la concentración de gotitas, pero reduce sus tamaños, pues una mayor cantidad de NCN compiten por la misma cantidad de

vapor. Twomey centró su idea en el impacto radiativo. Rescatando su idea pero centrándola en los efectos de los NCN en el desarrollo de la precipitación se sigue que si las gotitas son muy pequeñas los procesos de colisión-coalescencia son poco eficientes y no logran formar gotas capaces de vencer las fuerzas que las mantienen suspendidas y por ende la cantidad de precipitación puede alterarse.

Tras su etapa inicial, el desarrollo de una nube, así como el tipo y la cantidad de precipitación producida, depende en mayor medida de efectos de gran escala que de procesos microfísicos. Sin embargo los procesos microfísicos pueden determinar la susceptibilidad de una nube de producir precipitación y el tiempo que requiere para hacerlo (13). Dados los diversos orígenes de las nubes y la precipitación, la conexión entre la disminución de la cantidad de lluvia y el aumento de aerosoles es aún poco clara. Debido a que distintas combinaciones de distintos factores ambientales (estabilidad atmosférica, cizalla, humedad relativa, etc.) pueden provocar efectos opuestos (1).

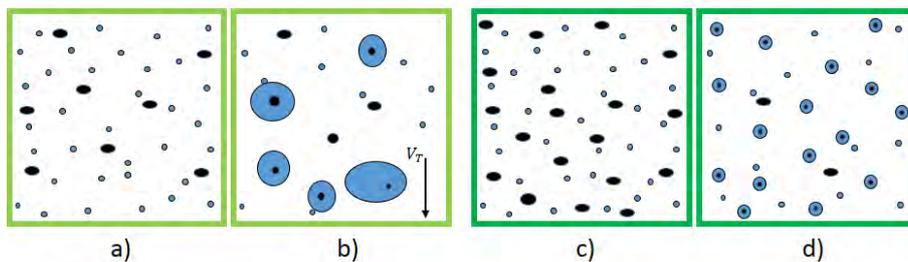


Figura 1.3: *Dibujo esquemático de la formación de gotas en ambientes con pocos NCN (a) y con exceso (c). Los círculos azules representan partículas de vapor de agua y los negros NCN. En las condiciones con pocos NCN, tras la condensación se forman pocas gotas pero de gran tamaño (b), mientras que con exceso de NCN se forman muchas gotas pero con radios pequeños y la precipitación puede verse afectada (d).*

1.1.3.1. Supresión y exceso de precipitación

El exceso de núcleos de condensación de nube afecta las nubes no sólo a través de los procesos de formación de gotitas, sino también por efectos radiativos que modifican las propiedades ópticas y la dinámica de las nubes y la lluvia. Considerando sólo los procesos de formación de gotitas, se ha propuesto que la cantidad de lluvia puede disminuir (o suprimirse) a través de aumentar la concen-

tracción de gotitas con radios pequeños, tal como se esquematiza en la figura 1.3d. El exceso de gotitas pequeñas provoca que los procesos de colisión y coalescencia sean poco efectivos. Lo anterior aumenta el tiempo en el cual la nube puede desarrollar precipitación o incluso inhibirla. En contraparte, se ha propuesto que la precipitación puede aumentar si los NCN son de tamaño grande (1). Debido a que entre más grandes son los NCN es más fácil que se activen, pues la sobresaturación que requieren es menor.

Khain *et al.* (9) utilizaron un modelo 2-D con una descripción detallada de la microfísica. Consideraron cinco formas de cristales de hielo y una descripción estocástica de las interacciones gotita-gotita, gotita-cristal y cristal-cristal para describir el crecimiento de las gotitas de nube y las gotas de lluvia. En su estudio buscaban entender el rol de aerosoles marinos (aire "limpio") y continentales (aire urbano) en la dinámica de la lluvia. Sus resultados les permiten proponer el siguiente escenario: dado que la precipitación debe de estar en balance con la evaporación, si en nubes bajas los aerosoles favorecen la evaporación y por tanto reducen la lluvia, este vapor puede llegar a niveles más altos de la atmósfera y vigorizar la lluvia de nubes más altas. Lo anterior se debe a que el vapor que asciende a niveles más altos puede formar cristales de hielo. La presencia de cristales de hielo aumenta la eficiencia de los procesos de colisión y coalescencia, además de adicionar los mecanismos propios de la lluvia fría. Además encontraron que la lluvia decrece cuando aumenta la concentración de aerosoles con tamaños en el rango $0.01 - 1 \mu m$, es decir NCN pequeños.

1.2. Modelo mínimo de convección atmosférica

Los modelos numéricos juegan un rol central en las ciencias atmosféricas actuales. Tanto para hacer pronóstico como con propósitos de investigación. Las ecuaciones que gobiernan el movimiento del fluido no pueden ser resueltas de forma analítica. La resolución numérica es necesaria para convertir el sistema diferencial de ecuaciones en un conjunto de ecuaciones algebraicas, a ser solucionadas por una computadora. Para resolver las ecuaciones continuas, previamente necesitan ser discretizadas. La atmósfera es representada por un conjunto de puntos en las tres direcciones. Estos puntos están espaciados horizontal y verticalmente y representan el estado de la atmósfera en ese punto, para cada tiempo. Por

tanto el número de puntos determina que tan bien se representa a la atmósfera en el modelo. El tamaño total del dominio y el espacio entre los puntos (resolución) determinan las escalas de los procesos que pueden ser resueltos numéricamente.

Los modelos mínimos están sustentados en modelar la mayor cantidad de procesos físicos con la menor cantidad de ecuaciones matemáticas, con el fin de entender procesos generales. Además, son una buena plataforma para probar hipótesis multicausales cuyas consecuencias son difíciles de observar, predecir o aislar.

1.2.1. Modelo mínimo de auto-conversión rápida

El modelo descrito, derivado y resuelto en este trabajo corresponde al propuesto por Hernandez-Duenas *et al.* (8). La motivación central del modelo es responder la pregunta: *¿Cuál es la representación mínima de la dinámica atmosférica y del agua capaz de reproducir regímenes de convección turbulenta organizada?*

Se denomina de *auto – conversión rápida* pues asume que el proceso de formación de vapor-lluvia es rápido en comparación con la escala de tiempo de los procesos dinámicos de interés. El modelo considera una atmósfera de tres dimensiones donde la densidad está descompuesta en un estado base y en las fluctuaciones de éste. En las fluctuaciones se consideran los efectos en todas las direcciones. El estado base solamente es función de la componente vertical, por tanto las variaciones horizontales no influyen en el movimiento de la parcela. A lo anterior se le conoce como aproximación de *Boussinesq*. La suposición anterior se sustenta en que un fluido con mayor densidad tiende a estar bajo uno con menor densidad y esto no puede ser ignorado. La anterior condición impone restricciones termodinámicas, que implican que la velocidad de la parcela siempre debe de ser menor que la del sonido. Esto impone un proceso isentrópico y adiabático. El sistema no intercambia calor con el entorno y la entropía del sistema se mantiene constante. En procesos isentrópicos la producción de entropía generada en el intercambio de energía con el entorno (por trabajo hecho sobre el sistema) está en equilibrio con la producción interna de entropía debida a procesos disipativos.

La construcción y diseño del modelo estuvieron sustentados en la idea de que las leyes de conservación de momento, energía, entropía húmeda (una definición que considera los cambios en la entropía del sistema debido a los cambios de fase del agua) y agua total debían ser consideradas, pero con la forma más sencilla (no trivial) posible. En el mismo sentido la microfísica considera ecuaciones de bulto¹ que describen los cambios de fase entre vapor (agua en fase gas) y agua de lluvia. En el modelo no hay descripción de agua de nube. Por tanto se considera que todo vapor que alcanza condiciones de saturación, forma agua de lluvia.

Las ecuaciones del modelo son: balance de momento, conservación de masa, conservación de las fases del agua (líquido y vapor) y temperatura potencial. La ecuación de balance de momento describe las fuerzas que actúan sobre el fluido y el movimiento consecuencia de las mismas. Los desplazamientos de la parcela están gobernados por el gradiente de presión y por los cambios de densidad (variaciones en el contenido de vapor-aire o de la temperatura en la parcela) que facilitan los movimientos verticales. Las ecuaciones que describen el comportamiento del agua en sus dos fases están fundamentadas en que existe un balance entre la evaporación y la condensación. Donde la razón de vapor que alcanza las condiciones de saturación se transforma en agua de lluvia, que puede permanecer así o evaporarse, dependiendo de las condiciones ambientales. Como consecuencia del trabajo realizado en un proceso adiabático por la parcela, la energía interna cambia y también su temperatura. La temperatura potencial es una definición matemática que considera estas causas de cambio. Adicionalmente, el modelo utiliza una definición que considera un balance entre la temperatura potencial y el calor latente.

1.3. Derivación del modelo

La derivación del modelo está sustentada en el formalismo *lagrangiano* de la dinámica de fluidos. En este formalismo el movimiento del fluido se describe tras conocer las trayectorias de una parcela cuyo movimiento es consecuencia de las fuerzas que actúan sobre el fluido. El modelo describe una parcela de la atmósfera terrestre cuyos movimientos verticales se deben a variaciones en la densidad

¹El autor no encontró una palabra en español con el mismo significado que tiene el término *bulk*, utilizado para describir este tipo de descripciones en inglés.

por cambios de fase, cambios en la temperatura potencial y el propio peso de la parcela (fuerza de flotación).

La parcela descrita es heterogénea, compuesta de aire seco, vapor de agua y agua de lluvia, no se describe el agua sólida (cristales de hielo, granizo, graupel) pues la microfísica es compleja y sale de las intenciones de este modelo mínimo, que busca tener la menor cantidad de variables que describan la física detrás del tema de estudio. La descripción de las partículas de hielo necesariamente debe hacerse detallada pues, a diferencia de las gotas, se forman distintos tipos de hielo a distintas temperaturas y condiciones de sobresaturación. Además, al agregar hielo es necesario incorporar al modelo una descripción de la interacción gotita-hielo, que no se resumen en colisión y coalescencia (como en el caso de la lluvia caliente), pues el contacto de una gota y un cristal puede formar graupel o granizo.

Dentro de los límites termodinámicos, la parcela es incompresible (horizontalmente), y por tanto se utiliza la aproximación de Boussinesq, bajo la cual en las ecuaciones solo se consideran relevantes los términos de densidad acompañados de la gravedad. Lo anterior reduce considerablemente el número de ecuaciones por resolver e impone algunas restricciones a la dinámica.

1.3.1. Conservación de la masa

El principio de conservación de masa del volumen de control (parcela) establece que la tasa de aumento de la masa en el volumen (V) es igual a la tasa a la que la masa cruza la frontera del volumen. La parcela es un volumen pequeño, suficientemente representativo de la atmósfera terrestre, con masa m y densidad ρ . Sustentados en lo anterior, el cambio de masa en la parcela es:

$$\frac{d}{dt} m(V, t) = \frac{d}{dt} \int_V \rho(x, t) dV = \int_V \frac{d\rho}{dt}(x, t) dV \quad (1.2)$$

Si el campo de velocidades del flujo es \vec{u} y \vec{n} es un vector normal que apunta hacia afuera de la frontera, entonces el flujo por unidad de área es:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = - \int_{\partial V} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} dV \quad (1.3)$$

Utilizando el teorema de la divergencia se encuentra:

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] dV = 0 \quad (1.4)$$

Para un volumen arbitrario la ecuación diferencial de conservación de masa, también conocida como ecuación de continuidad es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.5)$$

1.3.1.1. Aproximación de Boussinesq para la ecuación de continuidad

Bajo la aproximación de Boussinesq se propone que la densidad de la parcela (ρ) no varía mucho respecto a un valor de referencia (ρ_0) constante. Por tanto la densidad tanto se puede descomponer como:

$$\rho = \rho_0 + \rho'(x, y, z, t) \quad (1.6)$$

ρ' es la desviación del valor de referencia o promedio. Esta aproximación implica $|\rho'| \ll \rho_0$, es decir que las perturbaciones son mucho más pequeñas que el promedio.

Tras utilizar la regla de la cadena en la ecuación (1.5) y la descomposición (1.6), la ecuación de continuidad se reescribe:

$$\begin{aligned} \rho_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \rho' \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ + \left(u \frac{\partial \rho'}{\partial x} + v \frac{\partial \rho'}{\partial y} + w \frac{\partial \rho'}{\partial z} + \frac{\partial \rho'}{\partial t} \right) = 0 \end{aligned} \quad (1.7)$$

El tercer término de (1.7) implica cambios en la densidad espacial y temporalmente proporcionales al segundo término, dado que $|\rho'| \ll \rho_0$, estos términos son despreciables y la ecuación de continuidad toma su forma final tras la consideración de *Boussinesq* :

$$\rho_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = 0 \quad (1.8)$$

O, en su forma más común:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0$$

1.3.2. Balance de momento

El formalismo *lagrangiano* permite encontrar el campo de velocidad y aceleración de un fluido a partir de la descripción del movimiento de una parcela cuyas trayectorias son consecuencia de las fuerzas que actúan sobre el fluido.

1.3.2.1. Campos de velocidad y aceleración del fluido

Siendo $\vec{x}(x, y, z)$ un punto material contenido en el fluido, sus trayectorias $\vec{x}(x, y, z, t)$ a un tiempo fijo definen el campo de velocidades $\vec{u}(\vec{x}, t)$ del fluido. Las componentes paralelas al eje coordenado (u, v, w) del campo de velocidades definen para cualquier valor de t el movimiento en ese instante en todos los puntos del espacio ocupado por el fluido.

El campo de aceleraciones del fluido se obtiene tras derivar respecto al tiempo \vec{u} , obteniéndose:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \frac{D\vec{u}}{Dt} = \partial_t \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \quad (1.9)$$

Las anteriores son notaciones análogas entre sí de la derivada material. Para poder escribir la ecuación de balance de momento es necesario conocer las fuerzas que actúan sobre el fluido.

1.3.2.2. Fuerzas que actúan sobre la parcela

De forma general, sobre un medio continuo actúan fuerzas superficiales y volumétricas. En este trabajo solo se consideran fuerzas superficiales que actúan ortogonalmente a la superficie del volumen de control V , no se consideran esfuerzos tangenciales.

Siendo $P(\vec{x}, t)$ la fuerza ejercida por unidad de área (presión) sobre la superficie de V , la fuerza superficial se escribe:

$$S_V = - \int_V P \vec{n} dA \quad (1.10)$$

El signo de (1.10) se debe a la dirección en que apunta el vector \vec{n} . Tras definir un vector fijo (e) en el espacio, y reescribir (1.10), es posible utilizar el teorema

de la divergencia y encontrar el esfuerzo superficial :

$$S_V = - \int_V \nabla P dV \quad (1.11)$$

La fuerza de cuerpo (B_V) por unidad de masa en el volumen de control V es:

$$B_V = - \int_V \rho b dV \quad (1.12)$$

Utilizando (1.12), (1.11) y (1.9) podemos escribir el balance entre las fuerzas que afectan a la parcela y su aceleración. El balance de momento en su forma diferencial, para un volumen arbitrario y por unidad de masa, es:

$$\rho_0 \frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla P + \rho_0 \vec{b} \quad (1.13)$$

Las fuerzas volumétricas están representadas por \vec{b} , no se hace un análisis profundo de ellas, sin embargo utilizando los principios de la aproximación de *Boussinesq* se justifica que estas fuerzas pueden ser despreciadas excepto en su componente vertical, pues la densidad y la gravedad le dan peso al volumen de control (5).

La fuerza vertical se conoce como fuerza de flotación (\vec{b}) y representa la acción de la gravedad en las fluctuaciones de la densidad (6), (13). Estas fluctuaciones pueden deberse a cambios de presión o temperatura.

$$\vec{b} = -g \left(\frac{\rho'}{\rho} \right) \hat{k} \quad (1.14)$$

donde \hat{k} indica la dirección de la gravedad y ρ' es una desviación del promedio ρ . Reescribiendo la ley de gases ideales para los términos de la descomposición de ρ se tiene:

$$\left(\frac{\rho'}{\rho} \right) = \frac{P'}{P_0} - \frac{T'}{T_0} \quad (1.15)$$

Donde P representa la presión y T la temperatura, y el superíndice $'$ corresponde a la desviación del promedio (con subíndice 0). Tras hacer un análisis de escala se comprueba que para un gas ideal la contribución de las perturbaciones de la presión a la flotabilidad puede ser despreciada si se cumple la condición $\frac{u_0^2}{c^2} \ll \frac{T'}{T_0}$. El análisis de escala puede consultarse en (6). La velocidad del sonido de un fluido ideal isentrópico es c y u_0 es una escala típica de velocidad de la parcela.

Lo anterior permite aproximar la fuerza de flotabilidad para un gas ideal:

$$\vec{b} \approx g \left(\frac{T'}{T_0} \right) \hat{k} \quad (1.16)$$

1.3.2.3. Derivación de la fuerza de flotación

La aproximación anterior es buena pero insuficiente para las motivaciones del presente trabajo, pues su validez proviene de considerar un gas ideal compuesto por una sola sustancia.

Al utilizar la definición de temperatura potencial virtual líquida (θ_{rv}), es posible reescribir la temperatura de un gas ideal para un sistema heterogéneo (compuesto por aire seco, vapor de agua y agua líquida) simplemente en proporciones de la masa total del gas ideal.

Emanuel (6) propone una definición de temperatura potencial virtual de agua líquida (θ_{rv}).

$$\theta_{rv} = \theta_v \left(1 - \frac{q_r}{1 + q_t} \right) \left(1 - \frac{q_r}{\varepsilon + q_t} \right)^{\chi-1} \left(1 - \frac{q_r}{q_t} \right)^{-\gamma} \exp \left[\frac{-\mathcal{L}_v q_r}{(c_{pd} + q_t c_{pv}) T} \right] \quad (1.17)$$

La ecuación (1.17) representa la temperatura que tendría una parcela que experimenta cambios en el volumen durante procesos adiabáticos y cambios de fase liquido-gas. La masa total de esta parcela es la suma de las proporciones de vapor de agua y agua líquida.

La temperatura potencial virtual (θ_v) se define:

$$\theta_v = T_v \left(\frac{P_0}{P} \right)^\chi \quad (1.18)$$

T_v es la temperatura virtual

$$T_v = \frac{T}{1 - \frac{\varepsilon}{P_d} (1 - \varepsilon)} \quad (1.19)$$

$$\varepsilon = \frac{R_v}{R_d}; \gamma = \left(\frac{q_t R_v}{c_{pd} + q_t c_{pv}} \right); \chi = \left(\frac{R_d + q_t R_v}{c_{pd} + q_t c_{pv}} \right)$$

q es la razón de mezcla en $g\,kg^{-1}$, con el subíndice r para lluvia, v para vapor y t para total. Las constantes de los gases para vapor y aire seco son R_v y R_d respectivamente. La presión de vapor y la ambiental son e y p respectivamente. El calor específico es c_p con subíndice v para el vapor y d para el aire seco. El calor latente es \mathcal{L} .

Para linealizar θ_{rv} es preciso notar que $\frac{q_r}{q_t} \ll 1$, por tanto los términos que poseen este cociente pueden ser despreciados; además $1 + q_r \approx 1$, entonces (1.17) se reduce a :

$$\theta_{rv} \approx \theta_v(1 - q_r) \exp\left(\frac{-\mathcal{L}_v q_r}{c_{pd} T}\right) \quad (1.20)$$

Expandiendo θ_v en series de Taylor al rededor del 0 se obtiene:

$$\theta_v \approx \theta + \theta \frac{e}{P}(1 - \varepsilon) \approx \theta + \theta \frac{\varepsilon e(1 - \varepsilon)}{P \varepsilon} \quad (1.21)$$

$$q_v = \frac{\varepsilon e}{P} \quad y \quad \varepsilon_0 = \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \quad (1.22)$$

Utilizando las igualdades (1.22) se reescribe (1.21):

$$\theta_v \approx \theta + \theta q_v \varepsilon_0 \quad (1.23)$$

Para evitar la multiplicación de funciones y linealizar, se define θ del segundo término de (1.23) como una temperatura de referencia θ_0 .

Expandiendo de forma similar el término exponencial de (1.20):

$$\exp\left(\frac{-\mathcal{L}_v q_r}{c_{pd} T}\right) \approx \left(1 - \frac{\mathcal{L}_v q_r}{c_{pd} T}\right) \approx (1 - q_r) \quad (1.24)$$

Con base en lo anterior la aproximación de θ_{rv} es :

$$\theta_{rv} \approx \theta_v(1 - q_r) = \theta + \theta_0 q_v \varepsilon_0 - \theta_0 q_r \quad (1.25)$$

Tras hacer estas simplificaciones la forma de la fuerza de flotación propuesta en el modelo es:

$$\vec{b} \approx \hat{k} g \left(\frac{\theta}{\theta_0} + q_v \varepsilon_0 - q_r \right) \quad (1.26)$$

Considerando que θ y q_v pueden ser descompuestas en su estado base y una perturbación se encuentra la forma más sencilla de (1.26). Tras considerar la suposición de *Boussinesq*, las perturbaciones (indicadas con una virgulilla) solo son función de la coordenada vertical. q_r no es descompuesto, pues su estado base es ausencia de lluvia. Entonces:

$$\vec{b} \approx \hat{k} g \left[\frac{\theta - \tilde{\theta}(z)}{\theta_0} + (q_v - \tilde{q}_v(z)) \epsilon_0 - q_r \right] \quad (1.27)$$

Esta aproximación de la fuerza de flotación, la adimensionalización completa y el cálculo de la escala de θ_0 fueron descritos por primera vez en el trabajo de Majda y Xing (11), y pueden consultarse en su apéndice.

1.3.2.4. Ecuación de balance de momento

Las definiciones y simplificaciones anteriores permiten escribir la ecuación de balance de momento (1.13) en su forma final:

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla\phi + \hat{k} g \left[\frac{\theta - \tilde{\theta}(z)}{\theta_0} + (q_v - \tilde{q}_v(z)) \epsilon_0 - q_r \right] \quad (1.28)$$

donde por practicidad se define $\phi = \left(\frac{p}{\rho_0} \right)$.

En la ecuación 1.28 de balance de momento es importante recalcar que la parcela se mueve por el fluido (atmósfera) debido al gradiente de presión; además su aceleración disminuye si ocurre condensación y aumenta con la evaporación.

1.3.3. Temperatura Potencial

La temperatura potencial (θ) es la temperatura que tendría un gas ideal si fuera expandido o comprimido adiabáticamente entre dos niveles de presión. Su utilidad radica en que es un invariante en procesos adiabáticos secos. Por tanto es una buena indicadora de la temperatura real de la parcela, pues una parcela con movimientos verticales en procesos adiabáticos no intercambia calor con su entorno, pero su energía interna cambia (por el trabajo de expansión o compresión realizado) y su temperatura también. Al indicar la temperatura real de la parcela, θ se puede usar como trazador de la parcela, pues si la escala del proceso se puede considerar adiabática, la parcela se mueve en superficies de temperatura

potencial constante (16).

Matemáticamente θ se expresa:

$$\theta \equiv T \left(\frac{P_0}{P} \right)^{\frac{R_d}{c_p}} \quad (1.29)$$

P_0 es una presión de referencia, P la presión final, T la temperatura del aire, R_d la constante del aire seco y c_p la capacidad calorífica a presión constante del aire seco. Siguiendo la derivación de Bannon (2) :

$$\ln \theta = \ln T + \frac{R_d}{c_p} \ln \frac{P_0}{P} \quad (1.30)$$

y diferenciando la ecuación anterior:

$$c_p d \ln \theta = c_p d \ln T - R_d d \ln P \quad (1.31)$$

Además para procesos reversibles el cambio de entropía específica es:

$$dS = c_p \frac{dT}{T} - R \frac{dP}{P} \quad (1.32)$$

Utilizando estas dos últimas ecuaciones es posible escribir:

$$dS = c_p d \ln \theta = c_p \ln \theta \quad (1.33)$$

La entropía específica está dada por el logaritmo de la temperatura potencial, conservada durante procesos adiabáticos.

Con base en lo anterior y utilizando la definición de entropía se llega a:

$$\frac{\rho c_p}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} = \frac{Q}{T} \quad (1.34)$$

donde Q es la producción de calor por unidad de volumen. En este modelo Q se reduce al calor latente (\mathcal{L}) de las transiciones de fase, condensación (C) y evaporación (E).

$$Q = \rho (\mathcal{L} C - \mathcal{L} E) \quad (1.35)$$

Los signos en (1.35) se deben a que la evaporación utiliza calor del sistema, de forma opuesta la condensación.

Utilizando el teorema de transporte y la relación (1.35) la ecuación que describe espacial y temporalmente la temperatura potencial es:

$$\frac{D\theta}{Dt} = \frac{\mathcal{L}}{c_p}(C - E) \quad (1.36)$$

La ecuación (1.36) establece que los cambios en la temperatura potencial de la parcela se deben únicamente al calor latente liberado durante los cambios de fase. La energía de los cambios de fase se conserva en procesos adiabáticos. La temperatura potencial aumenta con la condensación y aporta energía para que la parcela se desplace hacia capas más frías y altas, donde ocurre condensación y posiblemente precipitación. Cuando θ disminuye es debido a la evaporación, que requiere calor del sistema, posiblemente inhibiendo el ascenso vertical.

1.3.4. Conservación del agua

Esta sección describe la conservación del agua líquida y el vapor en el sistema, considerando que en cuanto existen condiciones de saturación el vapor se convierte en agua líquida. Las condiciones para los cambios de fase se resuelven por medio de cerraduras explicadas al final de la sección.

1.3.4.1. Conservación del agua líquida

En el presente modelo la razón de mezcla (q_r) del agua líquida se entiende solo como agua de lluvia, no hay agua de nube. Lo anterior implica que en cuanto el vapor de agua se condensa comienza a precipitar a una velocidad de caída. Por practicidad en el modelo se utiliza la velocidad terminal de lluvia (V_{Tr}). La diferencia entre la velocidad de caída y la terminal radica en que la segunda sólo es válida en el punto en el cual la suma de las fuerzas de flotación y de arrastre de una gota son iguales a la suma de fuerzas que la mantiene suspendida. En el punto de validez de la velocidad terminal, la aceleración es nula (pues las fuerzas están en equilibrio) y la velocidad constante.

El teorema de transporte establece que es posible escribir cualquier función de

\bar{x} y t para un volumen arbitrario en función de la derivada material (4). Con base en lo anterior la ecuación para el agua de lluvia es:

$$\frac{Dq_r}{Dt} - V_{Tr} \frac{\partial q_r}{\partial z} = C - E \quad (1.37)$$

La proporción de agua de lluvia en la parcela crece con la condensación (C), disminuye con la evaporación (E) y con la precipitación ($\frac{\partial q_r}{\partial z}$).

1.3.4.2. Conservación del vapor de agua

En el presente desarrollo se denomina vapor al agua en fase gas. De forma análoga a la derivación de (1.37) se tiene para el vapor:

$$\frac{Dq_v}{Dt} = -C + E \quad (1.38)$$

El vapor decrece por la condensación y aumenta por la evaporación.

1.3.4.3. Parametrización de los cambios de fase

Independientemente de la resolución del modelo, existen procesos físicos y escalas de movimiento que no pueden ser representadas. Estos procesos son parametrizados. En la parametrización se consideran los efectos del proceso físico pero no se describen a fondo las causas físicas relacionadas. Un ejemplo en este trabajo son las parametrizaciones de la condensación y evaporación. Resolver las ecuaciones apropiadas requeriría trabajar en escalas milimétricas y la resolución del dominio computacional es en escala kilométrica. El calor liberado durante la condensación es fuente de energía para la atmósfera. Su relevancia hace que sus consecuencias no puedan ser omitidas, pero su profunda descripción puede ser evitada.

De forma general en modelos mínimos la forma de evitar la descripción microfísica de las nubes y los cambios de fase asociados es utilizando cerraduras. En el presente trabajo se utilizan las cerraduras para la evaporación (E) y para la condensación (C) usadas por Hernandez-Duenas *et al.* (8) que a su vez están basadas en el trabajo de Majda *et al.* (12).

$$E = \tau_e^{-1} q_*^{-1} \left(q_v - q_{vs}(z) \right)^+ q_r \quad (1.39)$$

$$C = \tau_c^{-1} \left(q_v - q_{vs}(z) \right)^+ \quad (1.40)$$

La notación $()^+$ representa la parte positiva de ambas cerraduras, q_{vs} es la razón del vapor saturado, q^* una escala de referencia con valor de 10 g kg^{-1} , τ_e y τ_c son escalas temporales para la evaporación y la condensación respectivamente, análogas a constantes químicas y a los números de Damköhler de combustión asociados. Los números de Damköhler son números adimensionales que relacionan la velocidad de una reacción con la velocidad en que se transporta la masa.

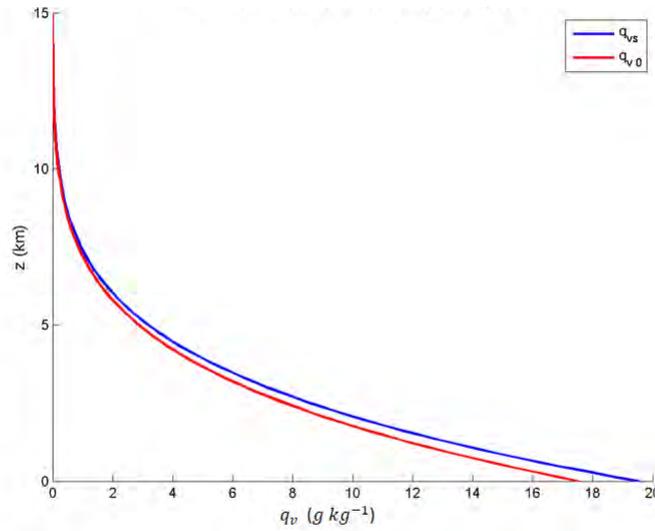


Figura 1.4: Perfil vertical de vapor propuesto. La línea azul representa el perfil propuesto para el vapor saturado y la curva roja el perfil inicial de vapor de la parcela.

Para la computación del modelo se propone un perfil vertical de saturación, como el que se muestra en la figura 1.4. El perfil fue obtenido a partir de modificar la ecuación de Clausius-Clapeyron e integrarla verticalmente, expandiéndola en series de Taylor y asumiendo que la presión y la temperatura sólo son funciones de la altura. La condensación se da cuando la parcela (curva roja) toca el perfil propuesto (curva azul). El modelo no permite la sobresaturación y a toda altura el perfil de la parcela se encuentra subsaturado respecto al perfil atmosférico.

Descripción de los núcleos de condensación de nube en el modelo

2.1. Ecuación para la capa de núcleos de condensación de nube

El teorema del transporte permite escribir cualquier función de la posición y el tiempo en términos de la derivada material (4). Utilizando este resultado, siendo q_c la concentración de NCN y V_{Tc} su velocidad terminal:

$$\frac{Dq_c}{Dt} - \frac{\partial}{\partial z}(q_c V_{Tc}) = 0 \quad (2.41)$$

La ecuación (2.41) describe espacial y temporalmente los NCN, que pueden ser removidos de la atmósfera de forma seca y húmeda. La deposición húmeda se da cuando un aerosol forma parte de una gota de agua o es barrida por una gota cayendo. Por el contrario la deposición seca se da cuando el aerosol no es transportada por lluvia. Por tanto cuando los NCN son removidos de forma húmeda caen a la velocidad de la lluvia y cuando caen de forma seca con su propia velocidad de caída, en función solo de su radio (r_d).

Bajo la misma justificación explicada para el agua de lluvia, la velocidad de caída de los NCN es reemplazada por su velocidad terminal (V_{Tc}):

$$V_{Tc} = V_{Tcd} + \frac{q_r}{q^*} [V_r - V_{Tcd}] \quad (2.42)$$

donde V_{Tcd} representa la velocidad terminal de un NCN en función de su radio original antes de absorber agua, V_r es la velocidad de la lluvia (5 m s^{-1}), q^* es un estado de referencia (10 g kg^{-1}). Cuando no hay lluvia ($q_r = 0$) la partícula

es removida a una velocidad terminal que solo depende de su tamaño inicial, mientras que en presencia de lluvia el segundo término de (2.42) es relevante.

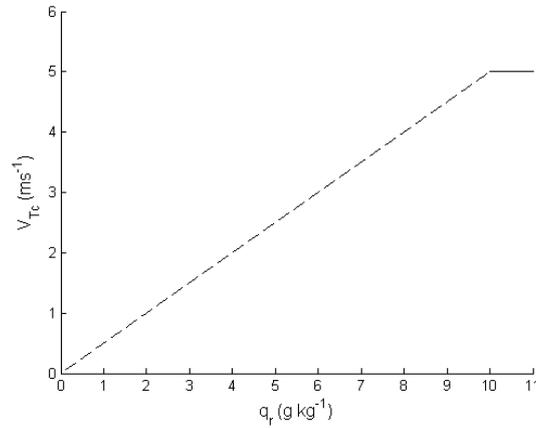


Figura 2.5: La velocidad del NCN aumenta conforme incrementa el tamaño de la gota en que se encuentra. Cuando ésta alcanza el tamaño para precipitar ($q_r = 10 \text{ g kg}^{-1}$) cae a la velocidad de la lluvia (5 m s^{-1}).

2.2. Parametrización del rol de los núcleos de condensación de nube en la formación de agua de lluvia

Retomando la ecuación (1.40) de la condensación se propone parametrizar el efecto de los NCN a través de la escala temporal τ_c . Tal que :

$$\tau_c^{-1} = \tau_0^{-1} \exp\left(-\left(\frac{q_c - \frac{1}{2}}{\gamma}\right)^2\right) \quad (2.43)$$

donde q_c representa la concentración de NCN, γ un parámetro de sensibilidad a la concentración y τ_0 una escala temporal de referencia. Los valores grandes de τ_c^{-1} se dan para los NCN que son eficientes en producir agua líquida (figura 2.6). Lo anterior se debe a que a valores mayores de τ_c^{-1} la velocidad de relajamiento de la condensación disminuye. De forma contraria, los NCN poco eficientes aumentan el tiempo en que se da la condensación. El parámetro τ_0^{-1} puede interpretarse de manera similar a un número adimensional de Damköhler, en el cual se compara la velocidad de una reacción química con la velocidad de transporte

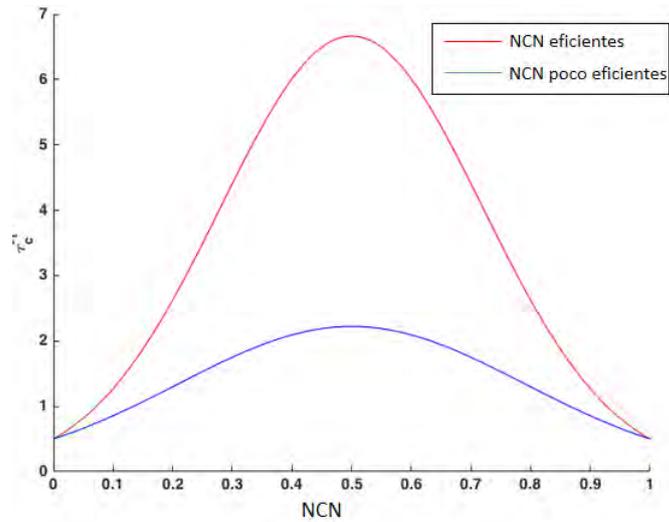


Figura 2.6: Efecto de la cantidad de NCN en la escala temporal de la condensación. La eficiencia de los NCN está definida por la velocidad en que promueven la formación de agua líquida. La abundancia de NCN está en unidades arbitrarias.

de la masa. En la figura 2.6 se muestra que ambos tipos de NCN promueven la activación y crecimiento de las gotitas, pero existe una diferencia en la eficiencia de conversión y crecimiento. La baja o alta concentración de ambos perjudica la formación de lluvia. Por el contrario, la precipitación es favorecida cuando las concentraciones son suficientes ($q_c \approx 0.5$) para promover la precipitación, pero no para alterar la concentración de gotas. Los valores de γ son 0.4 y 0.3 y los de τ_o 0.45 y 0.15 para los NCN poco eficientes y los eficientes, respectivamente. Estos fueron encontrados buscando que los NCN eficientes fueran tres veces más eficientes.

Como se explico en secciones anteriores, la formación de gotitas depende de la humedad ambiental, del tamaño y de la identidad química del NCN; por tanto los NCN eficientes podrían interpretarse como NCN con gran afinidad por el agua (hidrofílicos) o NCN con radios grandes, que requieran valores muy bajos de sobresaturación para activarse y que una vez activados colectan muchas gotas y crecen rápido. En contraparte, los NCN poco eficientes podrían ser interpretados como NCN con baja afinidad por el agua (hidrofóbicos), los cuales forman gotas muy pequeñas y disminuyen la eficiencia de los procesos de colisión y coalescencia, por tanto favorece en menor medida el desarrollo de gotas de precipitación.

Esquema numérico

El esquema numérico propuesto en este estudio está basado en el trabajo de Hernandez-Duenas *et al.* (8). Éste consiste en una descomposición pseudo-espectral en la dirección horizontal y diferencias finitas centradas de segundo orden en una malla escalonada en la dirección vertical. El modelo de auto-conversión rápida está integrado en el tiempo con un esquema Runge-Kutta de tercer orden. Este esquema ha mostrado ser estable para flujos turbulentos.

La condición pseudo-espectral del esquema proviene del hecho de que la transformada de Fourier es utilizada para aproximar las derivadas con multiplicaciones, aprovechando las condiciones (horizontales) periódicas del dominio. En esta sección se describe brevemente el error debido a esto (*aliasing*), el software utilizado para realizar la transformada discreta, seguido de la descripción del método Runge-Kutta para la integración temporal y el error de truncamiento asociado. Finalmente se muestra el esquema completo, discretizado, adimensionalizado e incompresible.

El modelo fue programado en Fortran y compilado en ifort, la paquetería FFTW aunque está escrita en C, es ejecutable en Fortran.

3.1. Transformada discreta de Fourier

En las coordenadas horizontales se utilizan condiciones periódicas en el dominio computacional, para esto se utiliza la transformada discreta de Fourier (*dft*), ya que al tener una función $a(x)$ periódica en $[0, L]$ donde L es la longitud del dominio, ésta puede ser descompuesta en una suma de senos y cosenos:

$$a(x) = \sum_k a_k e^{(i2\pi kx/L)} \quad (3.44)$$

donde e^{ix} es la formula de Euler para senos y cosenos y a_k los coeficientes de Fourier, los cuales tienen la forma:

$$a_k = \frac{1}{L} \int_0^L a(x) e^{\left(\frac{-i2\pi kx}{L}\right)} dx \quad (3.45)$$

Habiendo N puntos en L y considerando la periodicidad de $a(x)$ en L ($a_N = a_0$), a_k se aproxima con sumas de Riemann:

$$a_k \approx \frac{\Delta x}{L} \sum_{j=0}^{N-1} \hat{a}_k e^{\left(\frac{-i2\pi kx_j}{L}\right)} \quad (3.46)$$

Utilizando las definiciones : $\Delta x = \frac{L}{N}$; $x_j = j\frac{L}{N}$ (nodos de Fourier) se reescribe (3.46) como:

$$\hat{a}_k \approx \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} a_j f_{nj} \quad (3.47)$$

$f_{n,j} = e^{\left(\frac{-i2\pi kj}{N}\right)}$ es la matriz discreta de Fourier, la cual permite realizar la transformación deseada entre el espacio físico y el espacio de Fourier.

3.1.1. Error de aliasing

El esquema se denomina pseudoespectral debido a términos no lineales (convoluciones) no resueltos en el espacio de Fourier, sino en el espacio físico. Una multiplicación en el espacio físico es análogo a realizar una convolución en el espacio de Fourier. La convolución es computacionalmente cara. Una estrategia para evitarla es utilizar la transformada discreta de Fourier para ir al espacio físico y luego regresar al espacio de Fourier. Sin embargo esto agrega frecuencias espurias a la solución. Lo anterior es conocido como error de *aliasing*. Por tanto el error de aliasing se debe a la evaluación de la suma de una convolución utilizando la transformada de Fourier. Se ha demostrado que el error de aliasing es asintóticamente del mismo orden que el error de truncamiento (3).

Tomando dos series discretas de Fourier u_j y v_j

$$u_j = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{u}_m e^{ikx_j} \quad j=0,1,\dots,N-1 \quad (3.48a)$$

$$v_j = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{v}_m e^{ikx_j} \quad (3.48b)$$

El producto s de las series (3.48) es:

$$s_j = u_j v_j ; \quad j = 0, 1, \dots, N - 1$$

Los coeficientes de Fourier discreta de s son:

$$\hat{s}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} s_j e^{-ikx_j} ; \quad k=-N/2,\dots,N/2 \quad (3.49)$$

donde los nodos de Fourier son $x_j = \frac{2\pi j}{N}$.

Utilizando la ortogonalidad de las transformadas (3.48), (3.49) toma la forma:

$$\hat{s}_k = \sum_{m+n=k} \hat{u}_m \hat{v}_n + \sum_{m+n=k \pm N} \hat{u}_m \hat{v}_n \quad (3.50)$$

El primer término es la definición de convolución, mientras que el segundo es el error de aliasing.

3.1.2. Eliminación del error de aliasing

Una técnica común para reducir el error de aliasing es la regla de 3/2, que consiste en redefinir la malla original en el espacio físico por un factor $M \geq \frac{3}{2}N$ en todas las direcciones y evaluar las multiplicaciones no lineales en esta malla más fina y al final regresar la solución al espacio de Fourier.

La solución derivada a continuación se basa en el texto de Canuto *et al.* (3). Partiendo de que se tienen M puntos en lugar de N , se define $y_j = \frac{2\pi j}{M}$ como los

nuevos nodos de Fourier. Se obtiene $\bar{u}, \bar{v}, \bar{s}$ como los valores de u, v, s en y_j .

$$\bar{u} = \sum_{k=-M/2}^{M/2-1} \check{u}_k e^{iky_j} ; j=0,1,\dots,M-1 \quad (3.51a)$$

$$\bar{v} = \sum_{k=-M/2}^{M/2-1} \check{v}_k e^{iky_j} \quad (3.51b)$$

$$\bar{s} = u_j v_j \quad (3.52)$$

donde

$$\check{u} = \begin{cases} \hat{u} & |k| < N/2 \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

Los coeficientes \check{u} son los coeficientes \hat{u} adicionando ceros para las frecuencias espurias. La serie \check{s} ahora es de la forma:

$$\check{s} = \frac{1}{M} \sum_{j=0}^{M-1} \bar{s}_j e^{-iky_j} ; k=-M/2,\dots,M/2-1 \quad (3.53)$$

$$\check{s} = \sum_{m+n=k} \check{u}_m \check{v}_n + \sum_{m+n=k \pm N} \check{u}_m \check{v}_n \quad (3.54)$$

El interés únicamente radica en \check{s} de $|k| \leq N/2$ y bajo la condición de M el segundo término, debido al aliasing, es cero para estas k . Con esta elección de M se obtienen los coeficientes sin error debido al aliasing:

$$\hat{s} = \check{s} ; k = -N/2, \dots, N/2 - 1 \quad (3.55)$$

3.1.3. FFTW

Para realizar la transformada discreta de Fourier (*fft*) se utilizó el paquete FFTW (Fastest Fourier Transform in the West), el cual es una colección de subrutinas ejecutables en Fortran, escritas en C que permite calcular transformadas discretas de Fourier (7).

FFTW utiliza una definición no normalizada de (3.47). La normalización se evita al realizar primero el cálculo de "FFTW-forward" y posteriormente "FFTW-

backward”(dft inversa), definidos como:

$$(FFTW \text{ forward}) \quad a_k = \sum_{j=0}^{N-1} a_j e^{\left(\frac{-i2\pi kj}{N}\right)} \quad (3.56)$$

$$(FFTW \text{ backward}) \quad a_k = \sum_{j=0}^{N-1} a_j e^{\left(\frac{i2\pi kj}{N}\right)} \quad (3.57)$$

Por lo tanto aplicando (3.56) y posteriormente (3.57) multiplica por el número de puntos (N) a los datos, obteniendo el arreglo original escalado por N . Para los casos en que no se realicen ambos cálculos es necesario dividir el resultado por N .

FFTW posee distintas subrutinas para los casos en que se introduce un arreglo real y se obtiene uno complejo (r2c), o a la inversa (c2r) o si se introduce uno real y se obtiene un arreglo real (r2r) o análogamente con uno complejo (c2c). La idea central es que para cada caso existe una subrutina óptima, pues como se mostrará a continuación los cálculos y la forma de almacenar los resultados es distinta.

Para calcular la transformada de un arreglo real a uno complejo (r2c) se utiliza (3.56). El arreglo a_k de (3.56) posee simetría en el sentido $a_k = a_{N-k}$ y además a_k es periódico ($a_N = a_0$), debido a esta simetría la mitad del arreglo a es redundante, por lo tanto la transformada solo es calculada y es almacenada hasta $\frac{N}{2}$, el resto de las entradas son el complejo conjugado de las calculadas. Los datos se almacenan en la siguiente secuencia:

$$r_0, r_1, r_2, \dots, r_{n/2}, i_{(n+1)/2-1}, \dots, i_2, i_1$$

donde r_k representa la parte real del k -ésimo elemento del archivo de salida e i_k la parte imaginaria. Es importante notar que en $k = 0$ y $k = n/2$ la parte imaginaria es cero y por tanto no se almacena. En el cálculo de la transformada de un arreglo (c2r) se utiliza (3.57) del arreglo complejo a_j calculado en (r2c) (o un arreglo de datos guardados en el mismo formato), lo cual da como resultado un arreglo puramente real.

FFTW crea un plan óptimo dependiendo del sistema operativo y número de procesadores para cada caso en que se ejecuta. Es posible escoger el rigor, tiempo de computo o imponer restricciones a cada plan, lo anterior se hace mediante el uso

de banderas. Las más utilizadas son "FFTW_MEASURE" y "FFTW_PATIENT"; la primera es la opción automática del programa y crea un plan óptimo tras calcular varias *ffts* y calcular su tiempo de ejecución. FFTW_PATIENT realiza lo mismo que el anterior pero considera un mayor número de algoritmos, lo cual normalmente resulta en un mejor plan, sobre todo para arreglos grandes, con la única desventaja de requerir un mayor tiempo de cómputo para crear el archivo ejecutable (7). Una vez que se encuentra la mejor rutina, el programa ejecuta FFTW_PATIENT de manera óptima. Lo cual lo hace preferible en simulaciones largas.

3.2. Runge-Kutta de orden 3

La integración temporal del modelo está realizada con un esquema Runge-Kutta de tercer orden, a partir de un esquema Euler progresivo:

$$a^{n+1} = a^n + f(a^n, t_n) \Delta t$$

El esquema es como sigue:

$$a^{n+\frac{1}{3}} = a^n + \frac{\Delta t}{3} f(a^n) \quad (3.58)$$

$$a^{n+\frac{2}{3}} = a^n + \frac{2\Delta t}{3} f(a^{n+\frac{1}{3}}) \quad (3.59)$$

$$a^{n+1} = a^n + \frac{\Delta t f(a^n)}{4} + \frac{3\Delta t f(a^{n+\frac{2}{3}})}{4} \quad (3.60)$$

(3.58) y (3.59) representan pasos de pronóstico, los cuales hacen más preciso el método, mientras que (3.60) es el paso final utilizado para los demás cálculos. El paso de integración temporal (Δt) debe ser menor que la frecuencia de Brunt-Väisälä, para poder resolver la convección y ondas gravitacionales, además debe de cumplir con el criterio de Courant-Friederichs-Levy para ser un esquema estable.

3.2.1. Error de truncamiento

El error de truncamiento se debe a aproximar una derivada con series de Taylor y no conservar todos los términos de la misma. La expansión en series de

Taylor del esquema se puede consultar en el apéndice A. Para encontrar este error sustituimos una solución “exacta” (eq.6.89) en el esquema numérico propuesto (eq.6.86).

$$\begin{aligned} \frac{a^{n+1}-a^n}{\Delta t} - \frac{1}{4}f_n - \frac{3}{4}f_{(n+\frac{2}{3})} = \Delta t^3 \left[\frac{1}{24} \left(f''' f^3 + 4f^2 f' f'' + f(f')^3 \right) \right. \\ \left. - \frac{1}{36} \left(f^2 f' f'' \right) - \frac{1}{27} \left(f f' f''' \right) - \frac{1}{27} \left(f^3 f'' \right) \right] \end{aligned} \quad (3.61)$$

El error de truncamiento es de tercer orden $O(\Delta t^3)$.

3.3. Esquema numérico incompresible

En esta sección se muestra la forma final que toma el esquema numérico, listo para resolverse numéricamente. Bajo el esquema de incompresibilidad es necesario que todas las ecuaciones cumplan la ecuación de continuidad (condición de incompresibilidad) antes de ser programadas. Para encontrar el esquema incompresible es necesario eliminar momentáneamente la hidrodinámica y la ecuación de continuidad.

3.3.1. Esquema numérico incompresible

Las tres componentes de la ecuación de momento (1.13) pueden desplegarse:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -uu_x - vu_y - wu_z - \partial_x P \quad (3.62a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -uv_x - vu_y - wv_z - \partial_y P \quad (3.62b)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -uw_x - vw_y - ww_z + gb - \partial_z P \quad (3.62c)$$

Los subíndices representan diferenciación respecto a esa variable (*i.e.* $uu_x = u \frac{\partial u}{\partial x}$).

Las ecuaciones (3.62) son de la forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f_1(u, v, w, \theta) \quad (3.63a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = f_2(u, v, w, \theta) \quad (3.63b)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = f_3(u, v, w, \theta) + gb \quad (3.63c)$$

En la dirección horizontal se consideran condiciones periódicas, sea entonces el símbolo $\widehat{}$ la transformada de Fourier horizontal.

$$\widehat{f}_1 = -ik_x(\widehat{uu})(z) - ik_y(\widehat{vu})(z) - \frac{d(\widehat{wu})}{dz}(z) \quad (3.64)$$

Con base en lo anterior las ecuaciones (3.63) toman la forma:

$$\frac{d}{dt}\widehat{u}(z) = -ik_x(\widehat{uu})(z) - ik_y(\widehat{uv})(z) - \frac{d(\widehat{uw})}{dz}(z) \quad (3.65a)$$

$$\frac{d}{dt}\widehat{v}(z) = -ik_x(\widehat{uv})(z) - ik_y(\widehat{vv})(z) - \frac{d(\widehat{vw})}{dz}(z) \quad (3.65b)$$

$$\frac{d}{dt}\widehat{w}(z) = -ik_x(\widehat{uw})(z) - ik_y(\widehat{vw})(z) - \frac{d(\widehat{ww})}{dz}(z) + \widehat{gb} \quad (3.65c)$$

La integración temporal se realiza mediante el método de Runge-Kutta de orden 3 explicado en secciones anteriores, sin embargo aún falta discretizar verticalmente las ecuaciones (3.65). Para esto se utiliza una aproximación de diferencias centradas de segundo orden en una malla escalonada. En la figura (3.7) se muestra una malla escalonada, donde los valores de la componente w están desfasados en la vertical respecto a las demás variables del modelo. Lo anterior reduce la matriz a invertir de penta-diagonal a tri-diagonal. Además se puede observar que hay una celda más para w , dicho de otra forma:

$$z_j^w = j\Delta z \quad ; \quad j : 0 \rightarrow m$$

$$z_j^u = j\Delta z \quad ; \quad (j - 1/2) : 1 \rightarrow m$$

La discretización de la ec. (3.65) para la componente x es:

$$\frac{d}{dz}(\widehat{wu})|_{z_j^w} \approx \frac{(\widehat{wu})|_{z_j^w} - (\widehat{wu})|_{z_{j-1}^w}}{\Delta z} \quad (3.67)$$

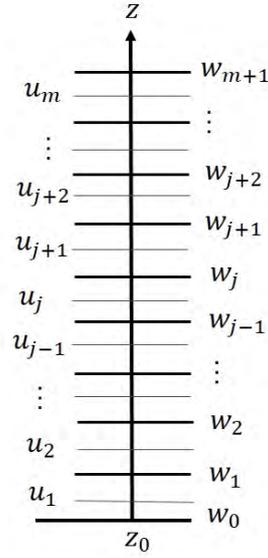


Figura 3.7: Malla escalonada. La línea gruesa corresponde al nivel de w , mientras que la línea tenue al de $u, v, \theta_e, P, q_v, q_r$.

Los términos de la discretización vertical anterior son:

$$(\widehat{wu})|_{z_j^w} = w_j \left(\frac{u_{j+1} + u_j}{2} \right) \quad (3.68a)$$

$$(\widehat{wu})|_{z_{j-1}^w} = w_j \left(\frac{u_j + u_{j-1}}{2} \right) \quad (3.68b)$$

Por lo tanto (3.67) es:

$$\frac{d}{dz} (\widehat{wu})|_{z_j^w} \approx \frac{w_j \left(\frac{u_{j+1} + u_j}{2} \right) - w_j \left(\frac{u_j + u_{j-1}}{2} \right)}{\Delta z} \quad (3.69)$$

La discretización es análoga para las demás variables que se encuentran al mismo nivel que u en la malla (v, θ_e, P, q_v, q_r).

La discretización de la componente w de (3.65) es:

$$\frac{d}{dz} (\widehat{ww})|_{z_j^w} \approx \frac{(\widehat{w^2})|_{z_j^w} - (\widehat{w^2})|_{z_{j-1}^w}}{\Delta z} \approx \frac{\left(\frac{w_{j+1} + w_j}{2} \right)^2 - \left(\frac{w_j + w_{j-1}}{2} \right)^2}{\Delta z} \quad (3.70)$$

En cada paso de la integración temporal con Runge-Kutta hay un u^* ($* = n + 1/3, n + 2/3, n + 1$) pero ninguno es incompresible, entonces para que lo sean se con-

sidera el gradiente de presión y la ecuación de continuidad. P está en el mismo nivel que u en la malla.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{u_*^{n+1} - u_*^n}{\Delta t} &= -ik_x \widehat{P}|_{z_j^u} \\ \Rightarrow u_*^{n+1} &= u_*^n - ik_x \widehat{P}|_{z_j^u} \Delta t \end{aligned} \quad (3.71)$$

De forma análoga para v y w se tiene:

$$v_*^{n+1} = v_*^n - ik_y \widehat{P}|_{z_j^u} \Delta t \quad (3.72a)$$

$$w_*^{n+1} = w_*^n - \frac{(\widehat{P}|_{z_{j+1}^u} - \widehat{P}|_{z_j^u}) \Delta t}{\Delta z} \quad (3.72b)$$

Las ecuaciones (3.71) y (3.72) permiten escribir una presión en cada z_j^u que cumpla con las condiciones de incompresibilidad, es decir con la ecuación de continuidad.

$$0 = \nabla \cdot \vec{u}$$

$$0 = ik_x \widehat{u}_*^{n+1} + ik_y \widehat{v}_*^{n+1} + \frac{w_*^{n+1} - w_*^{n+1}}{\Delta z} \quad (3.73)$$

Sustituyendo (3.71) y (3.72) en (3.73):

$$\begin{aligned} 0 = ik_x \left(\widehat{u}_*^n - ik_x \Delta t \widehat{P}|_{z_j^u} \right) + ik_y \left(\widehat{v}_*^n \right. \\ \left. - ik_y \Delta t \widehat{P}|_{z_j^u} \right) + \frac{w_*^n - \frac{\Delta t}{\Delta z} (\widehat{P}|_{z_{j+1}^u} - \widehat{P}|_{z_j^u}) + w_{*j+1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta z} (\widehat{P}|_{z_j^u} - \widehat{P}|_{z_{j-1}^u})}{\Delta z} \end{aligned} \quad (3.74)$$

Es importante notar que (3.74) está en el nivel de u , es decir $j : 1 \rightarrow m$.

Definiendo el número de onda horizontal como $k_h^2 = k_x^2 + k_y^2$ y reduciendo términos, (3.74) se reescribe:

$$0 = ik_x \widehat{u}_*^n + ik_y \widehat{v}_*^n + \frac{w_j^n - w_{j-1}^n}{\Delta z} + k_h^2 \Delta t \widehat{P}_{z_j^u} - \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (\widehat{P}_{z_{j+1}^u} - 2\widehat{P}_{z_j^u} + \widehat{P}_{z_{j-1}^u}) \quad (3.75)$$

Utilizando las condiciones de frontera $P_0 = P_1$; $P_{m+1} = P_m$ la ecuación de continuidad para $j = 2, \dots, m-1$ es:

$$\Delta t \widehat{P}_{j+1} - (2 + \Delta z^2 k_h^2) \Delta t \widehat{P}_j + \Delta t \widehat{P}_{j-1} = ik_x \widehat{u}_*^n + ik_y \widehat{v}_*^n + \frac{w_{*j}^n - w_{*j-1}^n}{\Delta z} \quad (3.76)$$

Para $j = 1$ se cumple que $P_0 = P_1$, en superficie $w_0 = 0$ y en el nivel m $w_m = 0$ por lo tanto (3.75) para este nivel es:

$$\Delta t \widehat{P}_2 - (1 - \Delta z^2 k_h^2) \Delta t \widehat{P}_1 + \Delta t \widehat{P}_{j-1} = ik_x \widehat{u}_*^n + ik_y \widehat{v}_*^n + \frac{w_1^n}{\Delta z} \quad (3.77)$$

De forma análoga para el nivel $j = m$:

$$-(1 - \Delta z^2 k_h^2) \Delta t \widehat{P}_m + \Delta t \widehat{P}_{m-1} = ik_x \widehat{u}_*^n + ik_y \widehat{v}_*^n - \frac{w_{m-1}^n}{\Delta z} \quad (3.78)$$

El conjunto de ecuaciones (3.76),(3.77),(3.78) da las condiciones de incompresibilidad para todos los puntos $j : 1 \rightarrow m$ de la malla.

En lenguaje matricial lo anterior es :

$$\begin{bmatrix} -(1 - \Delta z^2 k_h^2) & 1 & \dots & \dots & & \\ 1 & -(2 + \Delta z^2 k_h^2) & 1 & \dots & \vdots & \\ & 1 & -(2 + \Delta z^2 k_h^2) & 1 & & \\ \vdots & \dots & \dots & \ddots & 1 & \\ & \dots & \dots & \dots & 1 & -(1 - \Delta z^2 k_h^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widehat{P}_1 \\ \widehat{P}_2 \\ \vdots \\ \widehat{P}_{m-1} \\ \widehat{P}_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ik_x \widehat{u}_1 + ik_y \widehat{v}_1 + \frac{w_1}{\Delta z} \\ ik_x \widehat{u}_2 + ik_y \widehat{v}_2 + \frac{w_2 - w_1}{\Delta z} \\ \vdots \\ ik_x \widehat{u}_m + ik_y \widehat{v}_m - \frac{w_{m-1}}{\Delta z} \end{bmatrix}$$

3.3.2. Método de Thomas para matrices tri-diagonales

Para resolver el sistema anterior de ecuaciones para la presión se utiliza el método de Thomas, el cual es ampliamente utilizado para matrices tridiagonales. Está basado en una factorización LU (Lower-Upper). Véase (Lee)

Suponiendo un sistema matricial de la forma $Mx = r$ que puede ser reescrito como $LUx = r$, donde L es una matriz triangular inferior y U una matriz triangular superior. El sistema tiene solución al resolver $L\rho = r$ para ρ y $Ux = \rho$ para x , donde ρ contiene información de r y de dos de las diagonales de M . Por ende el método consiste en dos pasos: uno descendente en que se descompone la matriz M en L y U y se resuelve para ρ y otro ascendente en que se resuelve la ecuación $Ux = \rho$ para x .

En el método de Thomas la diagonal inferior de M se convierte en ceros, la diagonal principal en unos y la diagonal superior es reescrita en función de un factor γ que incluye la información de las tres diagonales y ρ , de tal forma que las ecuaciones a resolver sólo están en función de γ y ρ .

3.3.3. Adimensionalización de las ecuaciones

Antes de programar el modelo es necesario adimensionalizar el sistema de ecuaciones. La ecuación de continuidad no será adimensionalizada pues no es utilizada explícitamente en el código, sino que está incluida en el sistema de ecuaciones incompresibles derivado en secciones anteriores.

3.3.3.1. Escalas y variables dimensionales

La escala temporal del sistema es $T = 15 \text{ min}$, la escala espacial $L \sim 10 \text{ km}$, por lo tanto la escala de velocidad es $U = \frac{L}{T} \sim 11 \text{ ms}^{-1}$. Para encontrar la escala de ϕ es preciso analizar las unidades:

$$[\phi] = \frac{[P]}{[\rho]} = \frac{Nm^3}{m^2kg} = \frac{m^2}{s^2}$$

$$\Rightarrow \phi_0 \sim \frac{L^2}{T^2} \sim U^2$$

El calor latente escala como $\mathcal{L} = 2.5 \times 10^6 \text{ Jkg}^{-1}$, la aceleración de la gravedad como $g = 9.81 \text{ ms}^{-2}$, el calor específico $c_p = 10^3 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$, la razón de mezcla como $q = 10 \text{ gkg}^{-1}$ y la escala de la fluctuación de la temperatura como $\theta = 3 \text{ K}$.

Las siguientes definiciones son cantidades adimensionales de las variables del modelo, el superíndice * representa la cantidad adimensional y el subíndice 0 una escala típica.

$$u^* = \frac{u}{u_0}; v^* = \frac{v}{v_0}; w^* = \frac{w}{w_0}; t^* = \frac{t}{t_0}; \phi^* = \frac{\phi}{\phi_0}; V_T^* = \frac{V_T}{U_0}$$

3.3.3.2. Ecuaciones adimensionales

Utilizando las definiciones de la sección anterior y la regla de la cadena, las componentes x y y de la ecuación del momento son:

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \bar{u}^* \cdot \bar{\nabla}^* u^* = -\frac{\partial P^*}{\partial x^*} \quad (3.79)$$

$$\frac{\partial v^*}{\partial t^*} + \bar{u}^* \cdot \bar{\nabla}^* v^* = -\frac{\partial P^*}{\partial y^*} \quad (3.80)$$

La componente vertical posee un término extra debido a la fuerza de flotación, la cual es de la forma:

$$\vec{b} = g \left[\frac{\theta - \tilde{\theta}(z)}{\theta_0} + \varepsilon_0 (q_v - \tilde{q}_v(z)) - q_r \right]$$

El primer término de \vec{b} sin dimensiones es:

$$\frac{g \theta T^2}{\theta_0 U} = 9.81 \text{ ms}^{-2} \frac{3 \text{ K}}{300 \text{ K}} \frac{(15 \times 60 \text{ s})^2}{10^4 \text{ m}} = 7.946 \approx \varepsilon^{-1}$$

Si se realiza el mismo procedimiento para los términos restantes de \vec{b} se obtiene la componente vertical de momento sin dimensiones:

$$\frac{\partial w^*}{\partial t^*} + \bar{u}^* \cdot \bar{\nabla}^* w^* = -\frac{\partial P^*}{\partial z^*} + \varepsilon^{-1} (\theta'^* + \varepsilon_0 q_v'^* - q_r) \quad (3.81)$$

donde el superíndice $'$ se utilizó para recalcar que son fluctuaciones, q_r no posee, pues no hay fluctuaciones en la lluvia, ya que su estado base es ausencia de la misma.

La temperatura del agua de lluvia es:

$$\theta_r' = \theta' - \frac{\mathcal{L} q_r}{c_p}$$

adimensionalmente se expresa:

$$\frac{\partial \theta_r'^*}{\partial t^*} + \bar{u}^* \cdot \bar{\nabla}^* \theta_r'^* + w \frac{\partial \tilde{\theta}(z)}{\partial z} = -V_T^* \mathcal{L}^* \frac{\partial q_r^*}{\partial z^*} \quad (3.82)$$

Donde

$$\mathcal{L}^* = \frac{q \mathcal{L}}{c_p \theta} = \frac{(10 \text{ g kg}^{-1})(2.5 \times 10^6 \text{ J kg}^{-1})}{(10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1})(3 \text{ K})} = \frac{25}{3}$$

Resultados y discusión

4.1. Condiciones iniciales

El modelo fue iterado con distintas condiciones iniciales de altura y amplitud (abundancia) de la capa de núcleos de condensación, presencia (o ausencia) de cizalla ambiental y NCN con distintas eficiencias. En todos los casos el tiempo final de simulación fue de 5 horas, en un dominio computacional de $128 \text{ km} \times 128 \text{ km} \times 15 \text{ km}$, con una resolución de 1 km en la dirección horizontal y 0.15 km en la vertical. Las letras A, B, C, D distinguen entre sí los distintos casos. Cuando la letra de cada caso tiene subíndice s se hace referencia a la presencia de cizalla ambiental (por cizalla en inglés *shear*) y con subíndice p para los casos con NCN poco eficientes. A representa el caso base, en el cual hay suficientes NCN para promover la condensación y no afectar la concentración de gotas. La capa de NCN se encuentra centrada a 2 km de superficie y el máximo de NCN en el centro de la capa es 0.5 (en unidades arbitrarias de concentración). En el caso B la capa de NCN también se encuentra centrada a 2 km de superficie, pero en el centro de la capa la concentración máxima es 1. En los casos C y D se encuentra centrada a 3 km de superficie, con baja (0.5) y alta (1) abundancia de NCN, respectivamente. Por tanto los casos A y B se encuentran centrados a la misma altura, pero con diferente abundancia de NCN. De forma similar, en C y D, sin embargo se encuentran a mayor altura que los anteriores, como se observa en la figura 4.8. Inicialmente, en todos los casos, la capa de NCN se encuentra en el centro del dominio (en el plano xy) y tiene un radio de 5 km . Se utilizaron núcleos de condensación de nube eficientes ($\gamma = 0.3$ y $\tau_c = 0.15$) y poco eficientes ($\gamma = 0.4$ y $\tau_c = 0.45$). Los NCN eficientes promueven el cambio de fase con una eficiencia tres veces mayor que los NCN poco eficientes. La cizalla está dada por un perfil de un estado base de la velocidad \tilde{u} con un máximo de 10 m s^{-1} a 2 km de superficie. La velocidad inicial del NCN seco es $V_{Tc} = 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$ (para

un NCN con radio de $\approx 0.1 \mu m$,) y la velocidad de la lluvia $V_{Tr} = 5 ms^{-1}$ (cuando $q_r = 10 g kg^{-1}$). Inicialmente el vapor tiene un estado base subsaturado a todas las alturas (figura 1.4) y una fuente localizada en el centro del dominio (torre termal) los primeros seis minutos del modelo. El estado base de θ es $300 K$ y no tiene ninguna fluctuación inicial. Los valores de las constantes termodinámicas son los utilizados en la sección 3.3.3. La velocidad de la lluvia, el perfil de vapor, el perfil de cizalla, las dimensiones del dominio y la resolución del modelo corresponden a los utilizados en los trabajos de Hernandez-Duenas *et al.* (8) y Majda y Xing (11) que utilizaron previamente este modelo. La velocidad del NCN seco corresponde al radio mínimo que un NCN debe de tener para activarse, como se describe en la sección 1.1.2.1. La torre termal se colocó de 0 a 6 *min* para facilitar el ascenso de los NCN, en iteraciones no reportadas del modelo se colocaron 5 torres termales, espaciadas temporalmente por 20 *min* entre sí, pero los NCN eran retirados rápidamente de la atmósfera y se creaban resultados poco realistas para el agua líquida. Aunque la precipitación se desarrolla (desde la activación hasta la primeras gotas) en alrededor de 40 *min* o 1 hora, se utilizan 5 horas como tiempo final de simulación para poder observar por más tiempo el comportamiento de los NCN.

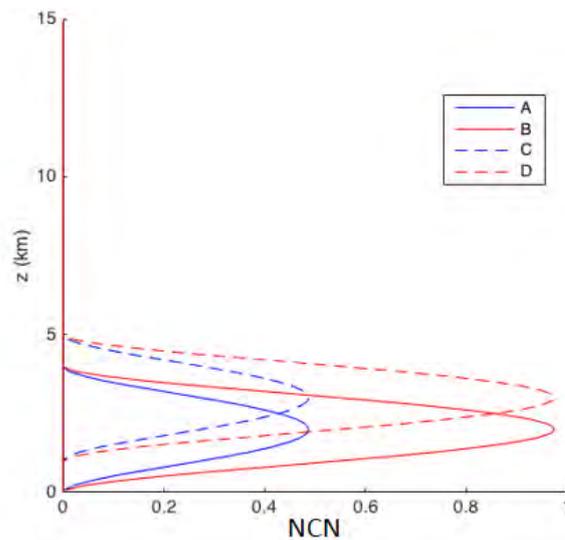


Figura 4.8: Altura y abundancia iniciales de la capa de núcleos de condensación de nube para todos los casos. La abundancia de los NCN está en unidades arbitrarias.

4.2. Casos con núcleos de condensación de nube eficientes

4.2.1. Casos sin cizalla ambiental

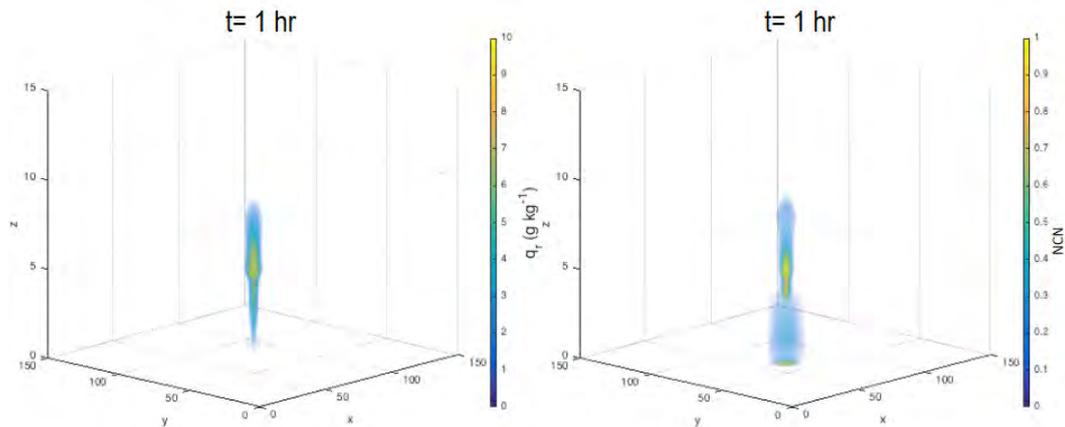


Figura 4.9: Primera hora del caso B para el agua de lluvia (izquierda) y los núcleos de condensación de nube (derecha). La torre termal inicialmente se encuentra en el centro del dominio y la capa de NCN centrada a 2 km de superficie. Se muestra este caso en 3-D por ser en el cual se observan mejor el comportamiento de ambas cantidades.

La figura 4.9 muestra el comportamiento del agua de lluvia (q_r) y los núcleos de condensación de nube en la primera hora del modelo para el caso B. Inicialmente los NCN ascienden por la torre termal colocada en el centro del dominio. Esto propicia una distribución homogénea de NCN en la columna vertical y promueve la formación de agua de lluvia en niveles superiores.

El promedio temporal de las fluctuaciones del agua de lluvia para los cuatro casos se muestra en la figura 4.10. El caso base (A) muestra tres pulsos en la lluvia, siendo el tercero el más largo. Cuando los NCN se encuentran cerca de la superficie y en altas concentraciones (B) la cantidad de lluvia es la más intensa. También con mayor cantidad de lluvia respecto al caso base se encuentra el caso C, en que la concentración de NCN es baja pero se encuentran en niveles más altos de la atmósfera. El único caso que muestra una disminución en la cantidad de lluvia es D, en el cual los NCN se encuentran en abundancia y en capas altas. Aunque B y C propician un aumento en la cantidad de lluvia, temporalmente se comportan

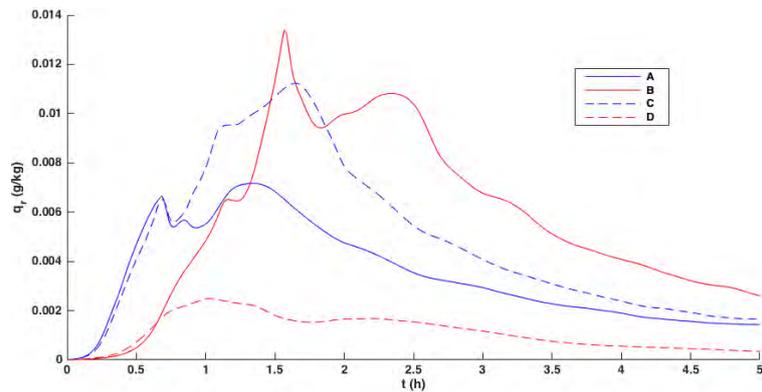


Figura 4.10: Promedio temporal vertical de la fluctuación del agua de lluvia (q_r) para los cuatro casos. La cantidad de lluvia es máxima cuando los NCN se encuentran en gran abundancia y bajas alturas (B). La lluvia también es mayor respecto al caso base cuando los NCN se encuentran en niveles altos y en pequeña abundancia (C). La disminución en la precipitación se da cuando los NCN son abundantes en altas capas (D).

distinto. El caso B muestra un retraso considerable en comenzar la producción de agua de lluvia.

En la figura 4.11 se muestra los máximos temporales y la distribución vertical del agua de lluvia en los cuatro casos sin cizalla. En el caso base (A) es apreciable que hay dos eventos de lluvia, el primero más corto que el segundo. Lo contrario se observa en el caso B, en que el segundo pulso de lluvia es mayor, además de que en el primer pulso es apreciable un retraso respecto al caso base, sin embargo el tercer pulso es más largo. El caso C presenta un retraso despreciable en el primer pulso de lluvia. Lo anterior es más evidente en la figura 4.10. En los casos A, B, C la lluvia se presenta hasta los 10 km. En el caso D la poca precipitación que se forma no toca la superficie. De forma similar a B, en D es apreciable un retraso en alcanzar el máximo.

La figura 4.12 ilustra el comportamiento de los máximos del vapor de agua a lo largo de las 5 h del modelo. En el caso base se aprecia que la evaporación es más o menos constante durante las 2 primeras horas, con cortos intervalos de aumento. De manera distinta, al observar los casos B y C es evidente que en ambos hay una alta evaporación alrededor de las 1.5 horas. En B el fin del primer periodo de alta evaporación ($\approx 1 h$) coincide con el inicio del primer pulso de lluvia. El aumento en la cantidad de vapor alrededor de las 1.5 h coincide con el periodo

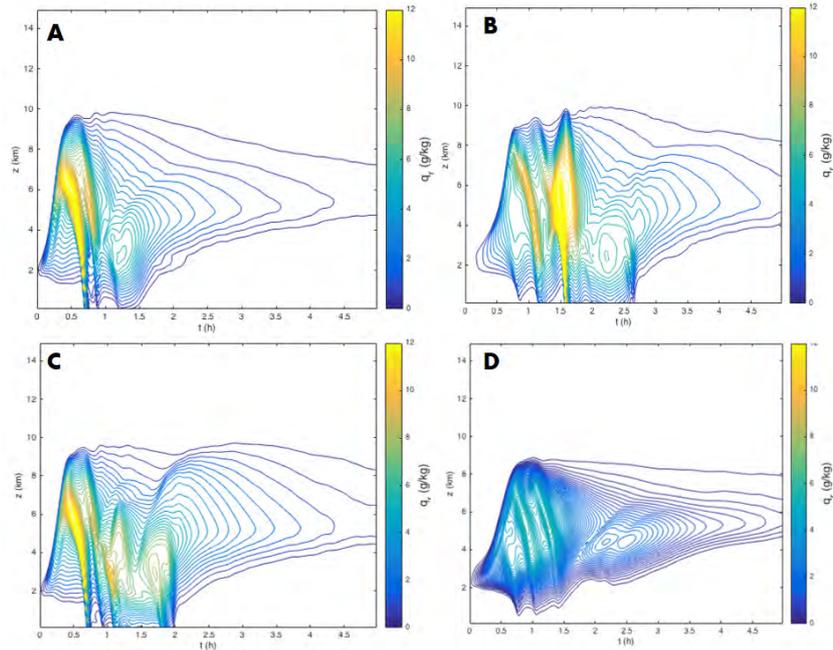


Figura 4.11: *Máximos temporales y comportamiento vertical del agua de lluvia (q_r) en el centro horizontal del dominio. Se puede observar, respecto a los demás casos, que en D la cantidad de lluvia es menor, además de presentarse a una menor altura. El caso B muestra su máximo en un segundo pulso y retrasado respecto a A.*

de mayor cantidad de lluvia. El caso C muestra evaporación considerable en la primera hora, el máximo de lluvia se encuentra entre los 30-60 primeros minutos. Alrededor de las 2 h se da una disminución vertical ($\approx 0-4$ km) de lluvia, acompañada de evaporación en niveles superiores ($\approx 4-8$ km) entre las 1.5-2 h. En el caso D se aprecian tres eventos de evaporación en tiempos y alturas distintas. El primer periodo ocurre $\approx 0-40$ min a partir de los dos primeros kilómetros, el segundo episodio ocurre alrededor de la primera hora entre los 0-2 km y el tercer evento a partir de 1.5 h y a ≈ 2 km. Esta altura coincide con la distancia a la que se observa la precipitación (que no toca la superficie).

El comportamiento temporal de los máximos de la abundancia de NCN se muestra en la figura 4.13. En ella se puede apreciar que en los casos en que la abundancia es poca (A y C) los NCN son removidos en un solo evento. De manera distinta, cuando hay mayor abundancia de núcleos de condensación de nube (B y D) son removidos en tres eventos distintos. En todos los casos los NCN muestran

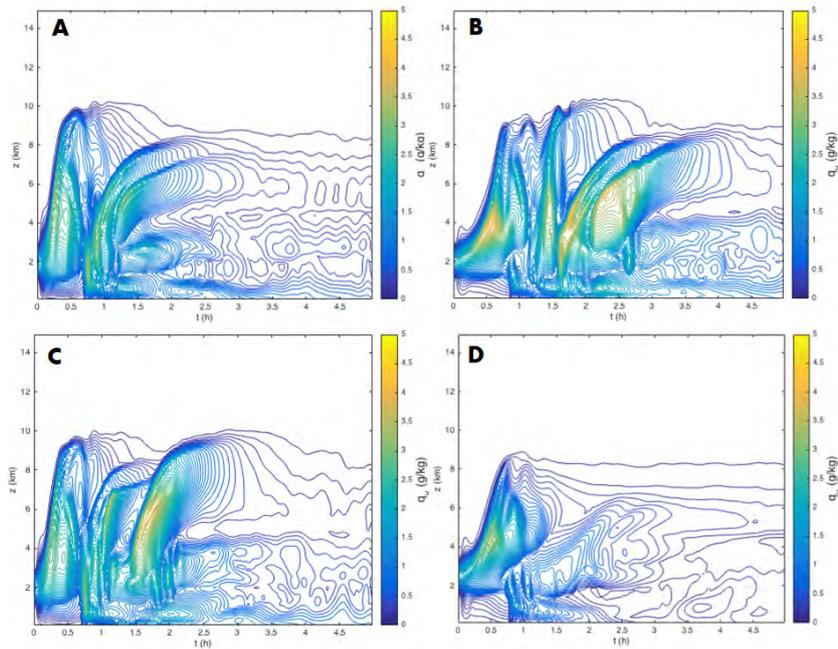


Figura 4.12: *Máximos temporales y comportamiento vertical del vapor de agua (q_v) para los cuatro casos en el centro horizontal del dominio. El caso B muestra durante la primera hora gran evaporación, y con cuatro pulsos distinguibles. En los casos B y D la evaporación inicial se da en niveles más altos.*

una migración hacia niveles más altos en los primeros 30 *min*. La remoción de NCN en A ($\approx 0.5-1 h$) se da a la par del máximo evento de lluvia. Tras alcanzar la superficie los NCN propician evaporación alrededor de los primeros 45 minutos, este evento se extiende hasta $\approx 1.5 h$ y $\approx 6km$. En B se observa que tras migrar a capas más altas, los NCN propician un evento marcado de evaporación entre 2-5 *km*. Posteriormente se ve un incremento ($\approx 1-1.5 h$) en su distribución vertical, acompañado del primer pulso de lluvia. Finalmente se observa que a las 1.5 *h* se da el último evento de deposición, acompañado del evento que produce la mayor cantidad de lluvia. El caso C se comporta de forma similar al caso base, para el momento en que la lluvia aumenta en un segundo pulso $\approx 1 h$ es posterior a la remoción de los NCN. En D se puede apreciar que los NCN rápidamente se distribuyen por la atmósfera. Alrededor de la primera hora se observa una alta concentración de NCN desde 0 a 6 kilómetros. Éstas altas concentraciones ocurren simultáneamente con el segundo evento de evaporación, producido desde la superficie hasta $\approx 3km$.

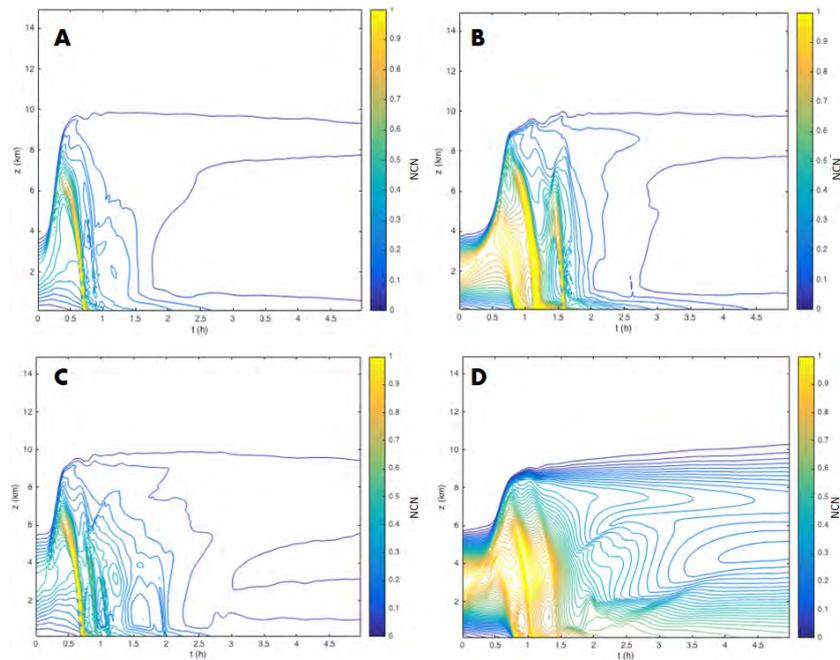


Figura 4.13: *Máximos temporales y comportamiento vertical de los NCN para los cuatro casos sin cizalla en el centro horizontal del dominio. En los casos de poca abundancia (A y C) los NCN son removidos mayoritariamente en un único evento. En los casos de mayor abundancia (B y D) son retirados de la atmósfera en tres eventos.*

4.2.1.1. Conclusiones

Con base en los resultados anteriores se puede concluir que el exceso de NCN retrasa el inicio de la lluvia, pero con una clara dependencia a la altura inicial de la capa. En bajos niveles la vigoriza, mientras que en altos la inhibe. Por otra parte cuando los NCN se encuentran en moderada abundancia y en altas capas favorecen la cantidad de lluvia sin retraso considerable. En los casos con moderada concentración de NCN, éstos son removidos de la atmósfera en un único evento. El rol de los NCN en los casos de abundancia es más complejo, pues son redistribuidos en la atmósfera en tres eventos bien definidos. En B el primer evento de deposición está acompañado de una lluvia ligera, el segundo evento está acompañado de una lluvia más fuerte que retira los NCN restantes. El caso B es el que presenta mayor cantidad de lluvia y de vapor. El retraso en la formación de lluvia generado por el exceso de NCN promueve la evaporación en niveles bajos y posterior vigorización de la lluvia.

4.2.2. Casos con cizalla ambiental

En la figura 4.14 se muestran los promedios temporales de la cantidad de lluvia para los cuatro casos. Con la presencia de cizalla ambiental la precipitación disminuye cuando la capa de NCN se encuentra en niveles altos, independientemente de su abundancia. El caso que produjo la menor cantidad de agua de precipitación (que no tocó la superficie) fue D_s . Cuando la capa de NCN se encuentra cerca de la superficie y en exceso (B_s) no se aprecia disminución significativa en la cantidad de lluvia, sin embargo el retraso en alcanzar el máximo de precipitación es evidente. Entre las 3-4 h se observa que B_s produce ligeramente mayor precipitación que A_s . El retraso no se observa cuando los NCN se encuentran en altos niveles y en baja abundancia (C_s) pero la disminución en la cantidad es notoria.

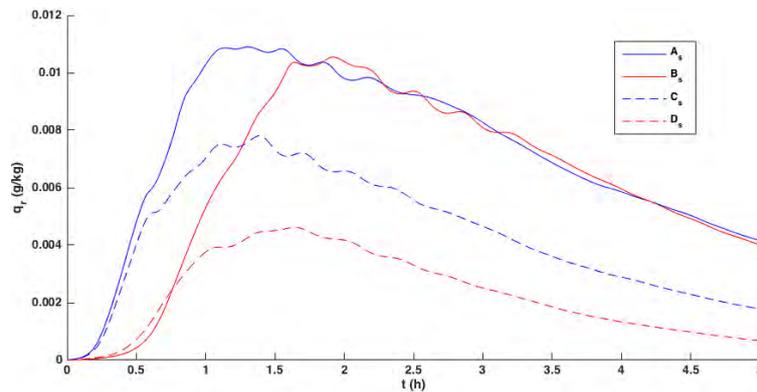


Figura 4.14: Promedio temporal de las fluctuaciones del agua de lluvia (q_r) para los cuatro casos. La cantidad de lluvia disminuye cuando los NC se encuentran en capas altas, independientemente de su abundancia. El caso B_s presenta un retraso en la formación de lluvia, pero no afecta su abundancia.

En la figura 4.15 se aprecia el comportamiento temporal de los máximos del agua de lluvia. El caso base (A_s) presenta precipitación alta y constante durante la primera hora del modelo. Ésta se concentra entre 2-8 km desde superficie. Se pueden apreciar dos pulsos fuertes de precipitación. Tras estos pulsos fuertes ($\approx 1.5 h$) la precipitación está localizada en dos regiones, una entre los 7-8 km y otra entre 2-3 km. De manera distinta, cuando la abundancia de NCN es grande y se encuentran en niveles bajos (B_s) existe un retraso en la primera precipitación y en la intensidad de la misma. También el comportamiento vertical del agua de lluvia se ve alterado. Los pulsos iniciales de precipitación fuerte que son observados en

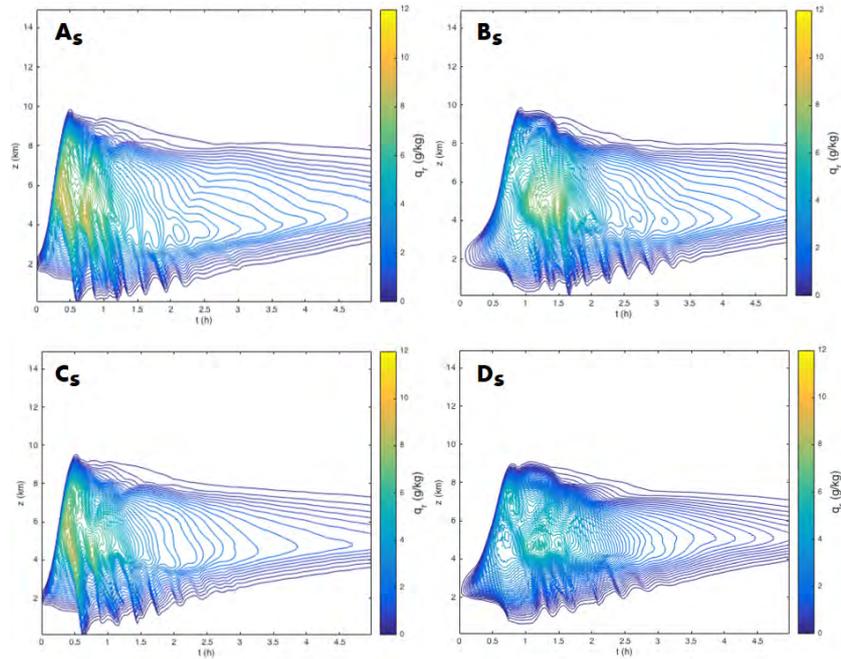


Figura 4.15: *Máximos temporales y comportamiento vertical del agua de lluvia (q_r) en el centro horizontal del dominio para los cuatro casos con cizalla. En los casos con exceso de NCN (B_s y D_s) es apreciable un retraso temporal en la formación de agua de lluvia.*

A_s no son apreciables en B_s . A diferencia se observa una distribución vertical homogénea durante las dos primeras horas. La diferencia en B_s es que la actividad de la capa inferior continua casi hasta ≈ 3.5 h. Este momento coincide con la región más larga en que B_s produce (ligeramente) mayor cantidad de agua de lluvia que A_s (figura 4.14). En el caso C_s no hay un retraso apreciable en la formación de lluvia, sin embargo la cantidad de lluvia es menor. El caso C_s muestra dos pulsos de lluvia, el segundo pulso es mucho menos vigoroso respecto al caso base. El caso D_s presenta la menor cantidad de precipitación y no toca la superficie.

En la figura 4.16 se puede apreciar para todos los casos con cizalla el comportamiento temporal y vertical del vapor de agua. En el caso A_s el vapor rápidamente es distribuido en los primeros 10 km. Entre las 0.5-1.5 h hay mucha evaporación entre los 2-8 km. Lo anterior coincide con la altura y tiempo en que se da la máxima lluvia. En el caso B_s es apreciable que inicialmente el vapor se encuentra a ≈ 1 km. Una vez que el vapor se encuentra distribuido desde la superficies hasta ≈ 10 km es que comienza la lluvia. Cuando los NCN son depositados promueven

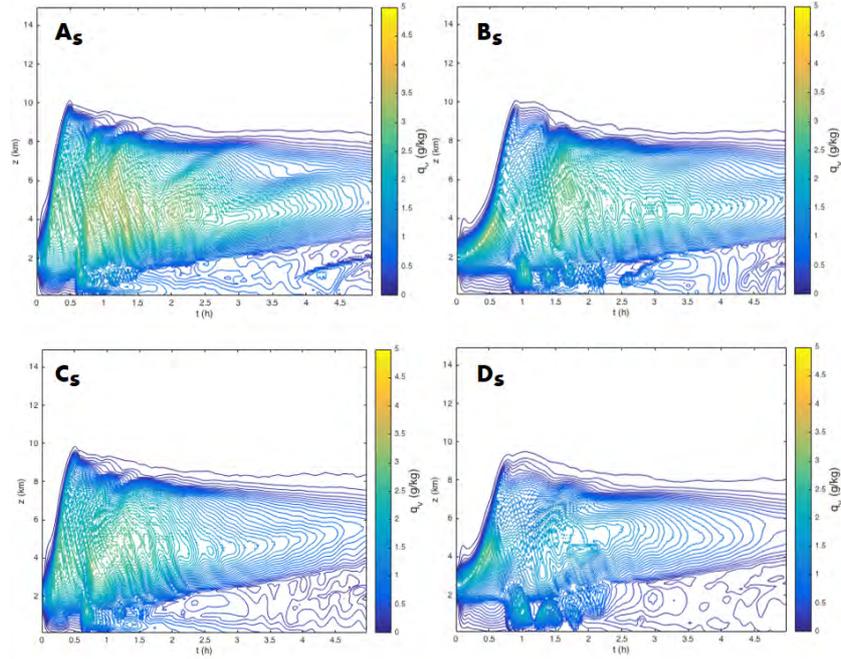


Figura 4.16: *Máximos temporales y comportamiento vertical del vapor de agua (q_v) en el centro horizontal del dominio para los cuatro casos con cizalla.*

la evaporación cerca de la superficie. Este vapor asciende hasta formar agua de lluvia ($\approx 1 h$). El caso C_S muestra un comportamiento similar al caso base (A_S), respecto a la distribución vertical y temporal del vapor de agua. Sin embargo produce mucho menos vapor y agua de lluvia. El momento de mayor producción de vapor ($\approx 1 h$) coincide con el momento de mayor producción de agua de lluvia. El comportamiento inicial del vapor en D_S es similar al caso B_S , sin embargo no presenta el segundo periodo de evaporación acompañado de agua de lluvia.

La figura 4.17 muestra el comportamiento de los núcleos de condensación de nube en los cuatro casos con cizalla. En todos los casos se puede apreciar que inicialmente hay una migración a niveles mayores. Tras esto, los casos A_S y C_S muestran un evento corto de deposición. En B_S es apreciable que tras la lluvia los NCN permanecen mayoritariamente cerca de la superficie. Lo anterior no sucede en los casos C_S y D_S . En ellos se diferencian dos regiones de NCN, una superior entre 4-6 km y otra inferior de 0-2 km. El retraso en la evaporación que se presenta en B_S y D_S ocurre paralelo a la máxima concentración de NCN entre los 0-4 km y 0-6 km, respectivamente. Cuando los NCN alcanzan la superficie ($\approx 1 h$) en ambos casos comienza la evaporación en superficie.

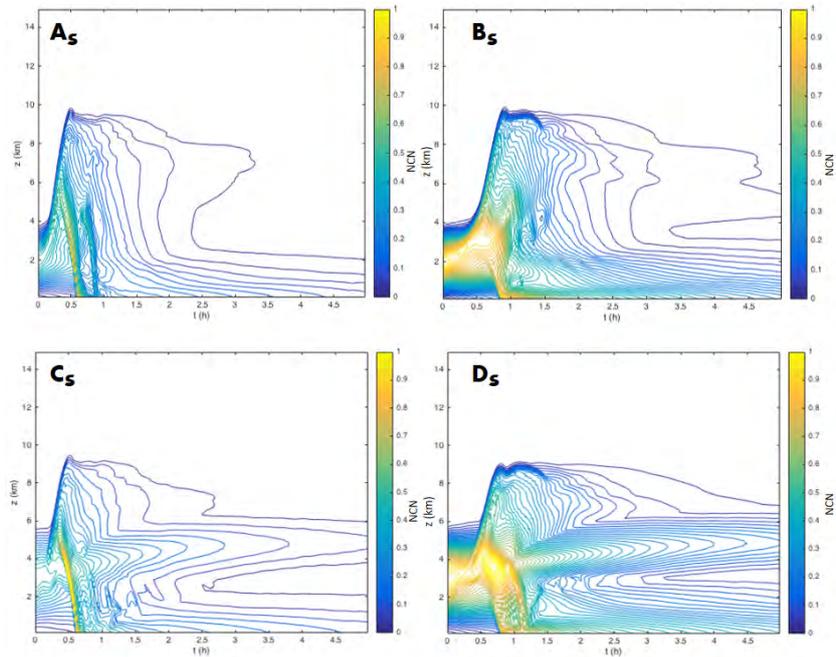


Figura 4.17: *Máximos temporales y comportamiento vertical de los NCN en el centro horizontal del dominio para los cuatro casos con cizalla. Los casos con una capa inicial de NCN alta muestran una región de NCN a $\approx 4-6$ km que propicia la evaporación en niveles altos.*

4.2.2.1. Conclusiones

En presencia de cizalla ambiental, el exceso de NCN, sin importar la altura inicial de la capa, retrasa la formación de lluvia. Por otra parte la capa de NCN en niveles altos, sin importar la abundancia, produce menor cantidad de lluvia que el caso base.

Cuando los NCN están en capas altas (C_s y D_s), sin importar su abundancia, tienden a formar dos regiones de NCN, una cerca de la superficie y otra entre 4-6 km. Lo anterior propicia que tanto la cantidad de vapor como de lluvia disminuyan. La formación de la capa superior de NCN promueve la evaporación en niveles altos, en donde ya no ocurre condensación.

En el caso en que los NCN se encuentran cerca de la superficie y en abundancia (B_s), tras la deposición los núcleos permanecen entre los primeros 2 km de la atmósfera y promueven la evaporación en niveles bajos. Este vapor asciende y una vez que se encuentra distribuido en toda la columna atmosférica es que co-

mienza la precipitación. Por tanto la evaporación en niveles inferiores es afectada por los NCN. Una vez que son depositados promueven la evaporación cerca de la superficie y facilitan el ascenso a niveles donde ocurre condensación.

4.3. Casos con núcleos de condensación de nube poco eficientes

Los núcleos de condensación de nube poco eficientes propician la formación de agua de lluvia con una eficiencia tres veces menor que los NCN eficientes utilizados en la sección anterior. Esto es apreciable en la figura 2.6. La eficiencia se traduce en la velocidad en que condensan el vapor, es decir en la velocidad en que producen agua líquida.

4.3.1. Casos sin cizalla ambiental

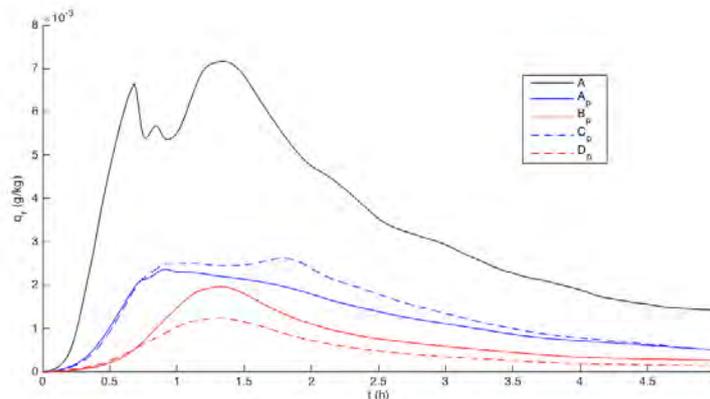


Figura 4.18: Promedio temporal de las fluctuaciones del agua de lluvia. Todos los casos con NCN poco eficientes producen menor cantidad de agua de lluvia que el caso base con NCN eficientes (A).

En la figura 4.18 se muestra el promedio temporal del agua de lluvia para todos los casos, comparados con el caso base de NCN eficientes (A). Todos los casos con NCN poco eficientes producen menor cantidad de agua de lluvia que los casos con NCN eficientes. Cuando los NCN se encuentran en poca abundancia y a niveles altos (C_p) se produce la mayor cantidad de agua de lluvia. Los casos con gran concentración de NCN (B_p y D_p) sin importar la altura, producen menor lluvia que A_p y C_p .

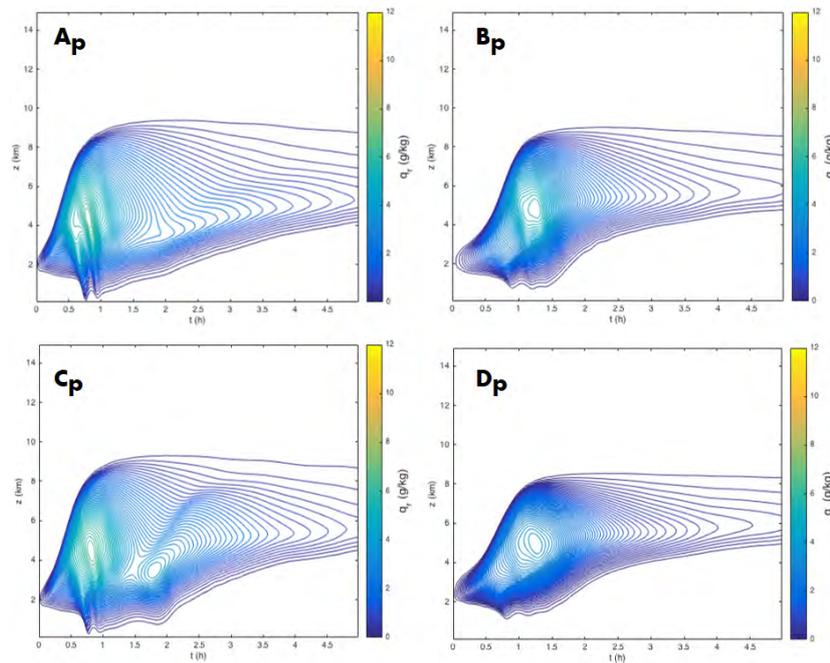


Figura 4.19: *Máximos temporales y comportamiento vertical de q_r en el centro del dominio para los cuatro casos sin cizalla y NCN poco eficientes. Es apreciable que el agua de lluvia formada no toca la superficie.*

La figura 4.19 muestra el promedio temporal del agua de lluvia para todos los casos. Se puede apreciar que en los casos B_p , C_p y D_p el agua que se forma no alcanza la superficie, sino que se evapora antes de. En el caso A_p hay muy poca lluvia. En comparación a los casos con NCN eficientes, no hay un retraso apreciable en la formación del agua de lluvia.

Los máximos temporales del vapor de agua para los cuatro casos sin cizalla y NCN poco eficientes se muestran en la figura 4.20. En todos los casos es apreciable que la evaporación comienza a partir de $\approx 1 \text{ km}$ desde superficie. Este vapor asciende hasta una altura de $\approx 8 \text{ km}$, dos kilómetros menos que los casos con NCN eficientes. A partir de la primera hora del modelo se observa, en todos los casos, que la evaporación se da en niveles altos y no en superficie. Esto inhibe la convección, debido a que el aire cercano a la superficie es menos rico en vapor y su densidad es mayor. Lo anterior implica que el vapor asciende a niveles donde no se cumple la condición de condensación y se forma muy poca agua de lluvia, que no toca la superficie.

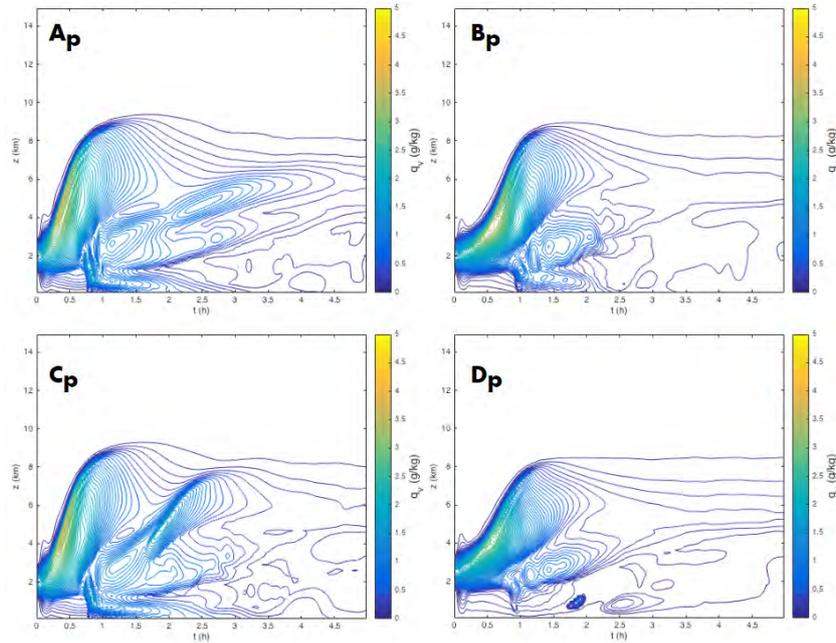


Figura 4.20: Máximos temporales y comportamiento vertical de q_v en el centro del dominio para los cuatro casos sin cizalla y NCN poco eficientes en el centro horizontal del dominio. La evaporación inicial en niveles altos inhibe la convección y la formación de agua de lluvia.

El comportamiento temporal de los núcleos de condensación de nube poco eficientes se muestra en la figura 4.21. En todos los casos se aprecia una rápida distribución de los NCN en la columna vertical. Todos los casos muestran la formación de una delgada capa de NCN alrededor de los ocho kilómetros, conforme el tiempo avanza esta capa se ensancha. Los casos de baja abundancia de NCN eficientes son retirados en un evento bien definido, en los casos A_p y C_p esto no es claro. Lo anterior se ve reflejado en que la evaporación inicialmente no se da en superficie, sino alrededor del primer kilómetro. Una vez que los NCN son depositados alrededor de la primera hora, en todos los casos, comienza la evaporación en superficie, que promueve un mayor ascenso de vapor. Sin embargo éste no alcanza una altura donde se cumplan las condiciones de condensación.

4.3.1.1. Conclusiones

Los NCN poco eficientes forman agua de lluvia en menor proporción que los NCN eficientes. Además el agua de lluvia formada no toca la superficie debido

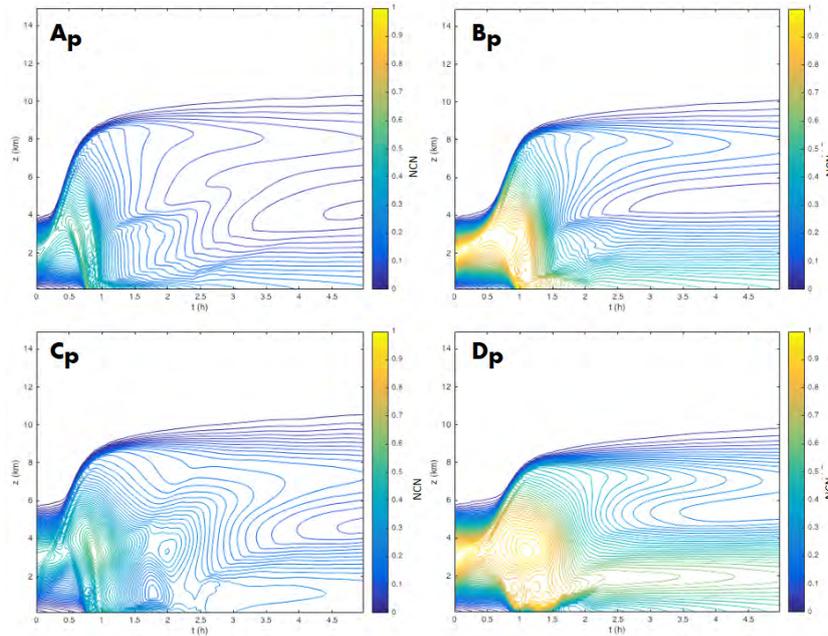


Figura 4.21: *Máximos temporales de NCN para los cuatro casos sin cizalla y NCN poco eficientes en el centro horizontal del dominio. A diferencia de los casos con NCN eficientes, en estos casos los NCN permanecen mayor tiempo en la atmósfera y forman regiones donde promueven la evaporación pero no la convección y formación de agua de lluvia.*

a que la distribución homogénea de NCN en toda la columna vertical propicia la evaporación del agua de lluvia formada. El vapor asciende pero no alcanza el nivel de condensación, por tanto se forma muy poca agua de lluvia.

El retraso en la formación de agua de lluvia por alta concentración de NCN (B_p y D_p) no es evidente, en comparación con los casos B y D con NCN eficientes. En los casos con baja concentración de NCN eficientes (A y C) éstos son retirados en un único evento, lo cual promueve la rápida formación de lluvia al fomentar evaporación cerca de la superficie, lo anterior no se observa en los casos similares de NCN poco eficientes (A_p y C_p).

4.3.2. Casos con cizalla ambiental

En la figura 4.22 se muestran los promedios temporales de las fluctuaciones del agua de lluvia para los cuatro casos con cizalla y NCN poco eficientes, comparados con el caso base con cizalla y NCN eficientes (A_s). Es evidente que todos

los casos con cizalla y NCN poco eficientes producen menor cantidad de agua de lluvia que A_s . Los casos con gran abundancia de NCN (B_{sp} y D_{sp}) muestran un retraso inicial en la formación de agua de lluvia.

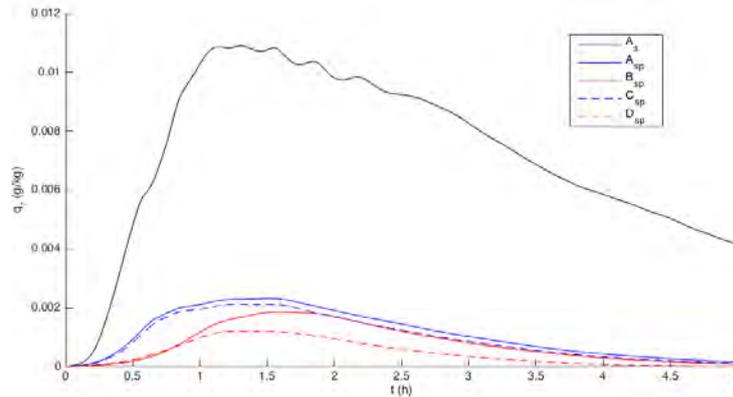


Figura 4.22: Promedio temporal de las fluctuaciones del agua de lluvia de los casos con NCN poco eficientes y cizalla, comparados con el caso base con NCN eficientes y cizalla (A_s).

La figura 4.23 muestra el comportamiento temporal y vertical de los máximos del agua de lluvia. En todos los casos se produce muy poca agua de lluvia y en ningún caso alcanza la superficie. De forma similar a los casos con cizalla y NCN eficientes, el agua de lluvia se localiza entre los dos y ocho kilómetros, sin embargo se produce en menor medida.

El comportamiento de los máximos temporales del vapor se muestra en la figura 4.24. La máxima evaporación en todos los casos se da durante los primeros treinta minutos del modelo y a partir del primer kilómetro. Sólo los casos A_{sp} y C_{sp} presentan evaporación cerca de la superficie ($\approx 45 \text{ min}$). En todos los casos a partir de la primera hora del modelo se presenta poca evaporación y en niveles altos (2-8 km). El poco vapor generado no alcanza niveles de saturación y produce cantidades muy bajas de agua de lluvia, insuficiente para alcanzar la superficie. El vapor que se forma alrededor de los dos kilómetros inicialmente inhibe la convección, debido a que es menos denso que el aire cercano a la superficie pobre en vapor. Dado que el vapor es poco y no alcanza niveles de saturación, la cantidad de calor latente liberado es baja y no promueve el ascenso a mayores altitudes.

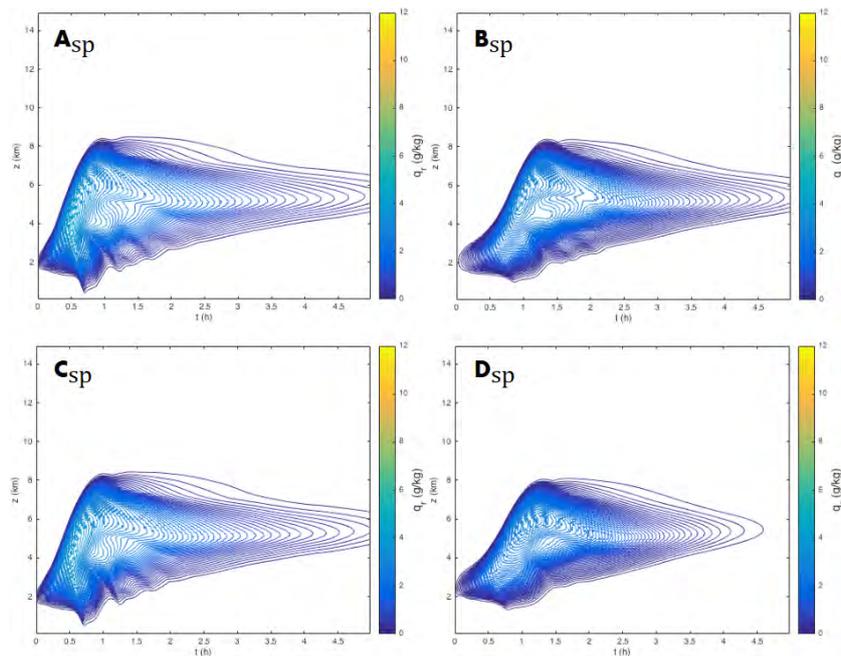


Figura 4.23: *Máximos temporales y comportamiento vertical del agua de lluvia en el centro horizontal del dominio para los casos con cizalla y NCN poco eficientes. Todos los casos producen bajas cantidades de agua de lluvia y en ninguno alcanza la superficie.*

Los máximos temporales de los núcleos de condensación de nube se muestran en la figura 4.25. Durante la primera media hora del modelo todos los casos distribuyen verticalmente los núcleos. En todos los casos, alrededor de la primera hora, se aprecia la formación de dos regiones de NCN, una cercana a la superficie y otra en niveles altos. La presencia de estas dos regiones de NCN poco eficientes, aunado a la baja producción de vapor, inhibe la formación de lluvia. En los casos B_{sp} y D_{sp} los núcleos de condensación de nube no se depositan por completo, esto puede deberse a que el agua de lluvia no toca la superficie.

4.3.2.1. Conclusiones

La presencia a cualquier altura y concentración de núcleos de condensación de nube poco eficientes inhibe la lluvia. Una posible explicación de lo anterior, es que el poco vapor producido en la atmósfera y la capa superior de NCN no se encuentran en niveles donde se promueva la condensación. La poca formación inicial de agua de lluvia propicia que la posterior evaporación sea poca y que no logre ascender hasta niveles donde vuelva a condensar y permanezca.

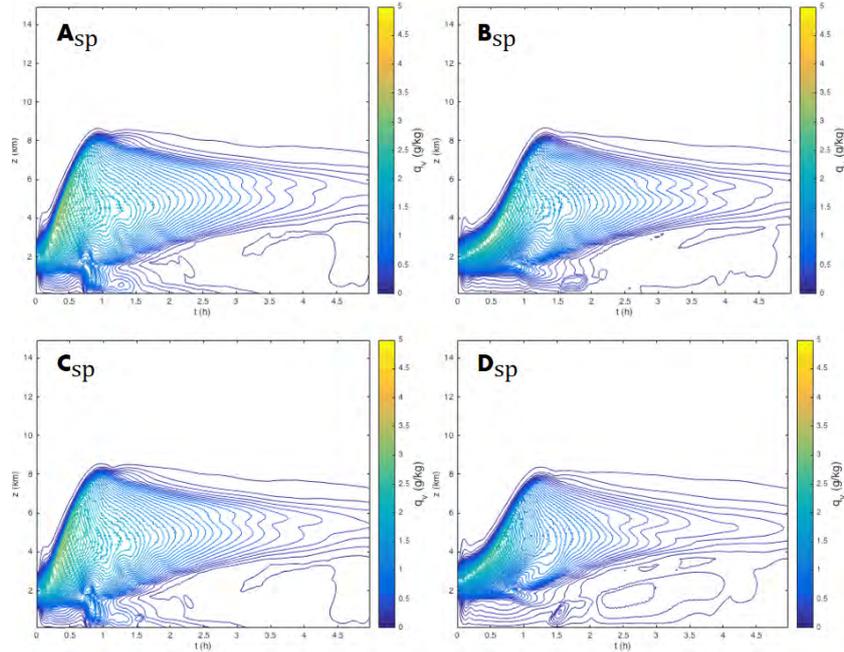


Figura 4.24: *Máximos temporales y comportamiento vertical del vapor de agua en el centro horizontal del dominio para los casos con cizalla y NCN poco eficientes. Inicialmente todos los casos presentan evaporación en niveles altos.*

4.4. Conclusiones Generales

En los casos sin cizalla, sin importar la eficiencia de los núcleos de condensación de nube, el exceso de éstos retrasa la formación de lluvia. En los casos con NCN eficientes la vigoriza si se encuentran cerca de la superficie y la inhibe si la capa inicialmente se encuentra a mayor altura. La diferencia crucial entre los NCN eficientes y los poco eficientes es la cantidad inicial de agua de lluvia que generan. Los eficientes inicialmente genera mucha agua líquida que se evapora, el vapor asciende y vuelve a condensarse, dado que la concentración de vapor que alcanza niveles de saturación es alta se forma mucha agua que toca la superficie. Los NCN poco eficientes inicialmente generan muy poca agua de lluvia, la cantidad de vapor generada tras la evaporación de esta agua es poca y no alcanza niveles de saturación. La formación del agua de lluvia inicial, debido al vapor que rápidamente asciende (con ayuda de la torre termal), es necesaria para promover evaporación en niveles donde el ambiente aun no permite que el agua líquida permanezca como tal, lo cual promueve la evaporación y hace que el vapor ascienda a niveles de saturación donde las condiciones ambientales favore-

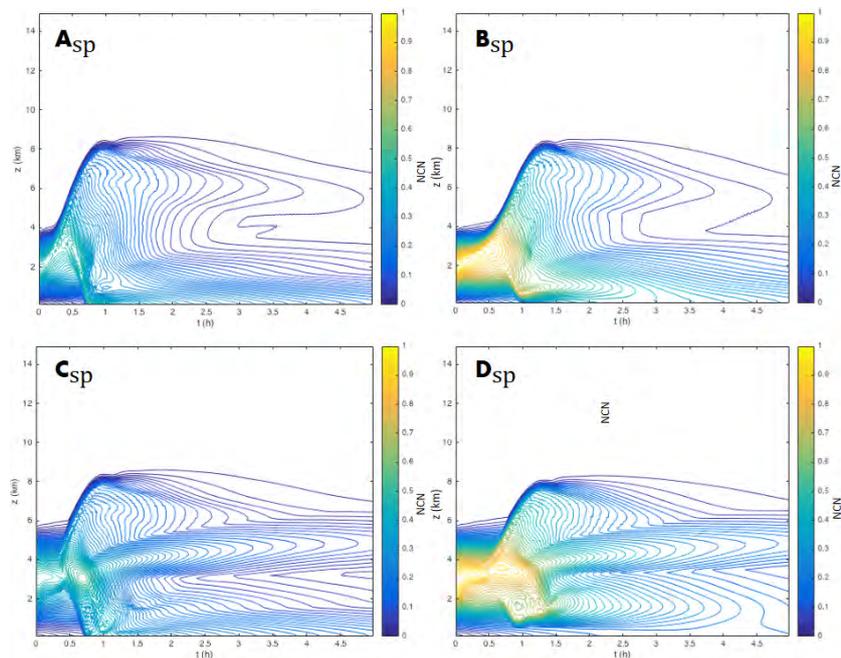


Figura 4.25: *Máximos temporales y comportamiento vertical de los NCN en el centro horizontal del dominio para los cuatro casos con cizalla y NCN poco eficientes.*

cen que permanezca en agua de lluvia y se acumule la suficiente para precipitar y alcanzar la superficie. En los casos con NCN poco eficientes (sin importar la presencia o ausencia de cizalla ambiental) el vapor asciende con ayuda de la torre termal, sin embargo dado que promueven la condensación en baja medida, no se forma agua de lluvia tempranamente y no sucede lo anteriormente descrito.

Sin importar la presencia o ausencia de cizalla ambiental, todos los caso con NCN poco eficientes inhiben la precipitación. En presencia de cizalla los NCN eficientes localizados inicialmente en capas altas, sin importar la abundancia, producen menor cantidad de agua de lluvia que los casos en que inicialmente la capa se encuentra a niveles bajos. La existencia de una región de NCN en niveles superiores (en los casos con cizalla y con NCN poco eficientes) afecta negativamente la formación de agua de lluvia.

Si se considera que los NCN eficientes representan NCN con radios grandes (pues se activan a menor saturación y producen agua líquida más rápido) y los NCN poco eficientes como partículas de radios chicos, se obtienen resultados similares a

los reportados por Khain *et al.* (9), en su estudio cuando los NCN tienen radios pequeños la precipitación es inhibida.

Aunque la parametrización de los NCN no considera efectos detallados sobre la dinámica de población de NCN, de gotitas y de gotas, el modelo es capaz de representar de forma satisfactoria el ciclo de condensación-precipitación-remoción. Hay casos en los cuales los NCN participan más de una vez en el evento, lo cual es de sorprender, pues incluso con lluvia (que los debería sedimentar) los NCN vuelven a activarse y su rol es más complejo. El modelo logra presentar los tres escenarios propuestos por la teoría debido al exceso de NCN, es decir, supresión, disminución y aumento de la precipitación. Otro logro del modelo es que muestra una clara diferencia en la estructura vertical de las cantidades mostradas (agua líquida, vapor y NCN) al considerar condiciones iniciales distintas. Adicionalmente, los tiempos de formación de lluvia son realistas (alrededor de una hora).

Bibliografía

- [1] Ayers, G. y Levin, Z. (2009). Air pollution and precipitation. En Heintzenberg, J. y Charlson, R. J., editores, *Clouds in the Perturbed Climate System, Their relationship to energy balance, atmospheric dynamics and precipitation*, capítulo 16, pp. 369–399. The MIT Press, Massachusetts.
- [2] Bannon, P. (1996). On the anelastic approximation for a compressible atmosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 53:3618–3628.
- [3] Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A., y Zang, T. A. (2006). *Spectral Methods Fundamentals in Single Domains*. Springer. 565 pp.
- [4] Chorin, A. y Marsden, J. (1998). *A mathematical introduction to fluid mechanics*. Springer. 3a edición. 169 pp.
- [5] Cushman-Roisin, B. y Beckers, J.-M. (2011). *Introduction to Geophysical Fluid Dynamics*. Academic Press. 828 pp.
- [6] Emanuel, K. A. (1994). *Atmospheric Convection*. Oxford University Press. 580 pp.
- [7] Friggo, M. y Johnson, S. G. (2017). *FFTW manual*. MIT. Recuperado en enero de 2017 de <http://www.fftw.org/fftw3.pdf>.
- [8] Hernandez-Duenas, G., Majda, A. J., Smith, L. M., y Stechmann, S. N. (2013). Minimal models for precipitating turbulent convection. *Journal of Fluid Mechanics*, 717:576–611. doi: 10.1017/jfm.2012.597.
- [9] Khain, A., Rosenfeld, D., y Pokrovsky, A. (2005). Aerosol impact on the dynamics and microphysics of deep convective clouds. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 131:2639–2663. doi: 10.1256/qj.04.62.

- [Lee] Lee, T. Tridiagonal matrices: Thomas algorithm. Thomas Method, University Lecture, Scientific Computation, University of Limerick. Recuperado en noviembre de 2016 de <https://www3.ul.ie/wlee/ms6021/thomas.pdf>.
- [11] Majda, A. y Xing, Y. (2010). New multi-scale models on mesoscales and squall lines. *Communications in Mathematical Sciences*, 8:113–144.
- [12] Majda, A., Xing, Y., y Mohammadian, M. (2010). Moist multi-scale models for the hurricane embryo. *Journal of Fluid Mechanics*, 657:478–501.
- [13] Rogers, R. y Yau, M. (1989). *A Short Course in Cloud Physics*. Butterworth Heinemann. 3a edición. 290 pp.
- [14] Rosenfeld, D., Lohmann, U., Raga, G., B Dowd, C., Kulmala, D. O., Fuzzi, M., Sandro Reissell, A., y Andreae, M. O. (2008). Flood or drought : How do aerosols affect precipitation ? *Science*, 321:1309–1314.
- [15] Seinfeld, J. H. y Pandis, S. N. (2006). *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. John Wiley and Sons Inc. 2a edición. 1225 pp. doi:10.1063/1.882420.
- [16] Tsonis, A. A. (2007). *An Introduction to Atmosphere Thermodynamics*. Cambridge University Press. 2a edición. 187 pp.
- [17] Twomey, S. (1977). The influence of pollution on the shortwave albedo of clouds. *Journal of the Atmospheric Sciences.*, 34:1149–1152.

Apéndice A

6.1. Expansión en series de Taylor del esquema numérico

Para encontrar el error de truncamiento debido a este esquema numérico comenzaremos por expandir en series de Taylor (3.58),(3.59),(3.60) alrededor de t_n :

$$f(a^{n+\frac{2}{3}}) = f\left(a^n + \frac{2\Delta t}{3}f(a^{n+\frac{1}{3}})\right)$$

$$\begin{aligned} f(a^{n+\frac{2}{3}}) \approx & f(a^n) + f'(a^n)\frac{2\Delta t}{3}f(a^{n+\frac{1}{3}}) + \frac{f''(a^n)}{2}\left(\frac{2\Delta t}{3}f(a^{n+\frac{1}{3}})\right)^2 \\ & + \frac{1}{6}f'''(a^n)\left(\frac{2\Delta t}{3}f(a^n)\right)^3 + \dots \end{aligned} \quad (6.83)$$

Haciendo lo análogo para (3.58):

$$f(a^{n+\frac{1}{3}}) = f\left(a^n + \frac{\Delta t}{3}f(a^n)\right)$$

$$f(a^{n+\frac{1}{3}}) \approx f(a^n) + \frac{\Delta t}{3}f'(a^n)f(a^n) + \frac{f''(a^n)}{2}\left(\frac{\Delta t}{3}f(a^n)\right)^2 + \dots \quad (6.84)$$

Combinando (6.84) con (6.83) obtenemos:

$$\begin{aligned} f(a^{n+\frac{2}{3}}) = & f_n + \frac{2\Delta t}{3}(ff') + \frac{2\Delta t^2}{9}\left(f(f')^2 + f^2f''\right) + \Delta t^3\left(\frac{1}{27}f^2f'f'' \right. \\ & \left. + \frac{4}{81}ff'f'' + \frac{4}{81}f^3f'''\right) + \Delta t^4\left(\frac{1}{243}f^3f'f'' + \frac{2}{81}f^2(f')^2f''\right) + \dots \end{aligned} \quad (6.85)$$

Utilizando (6.85) el término $\frac{1}{4}f_n + \frac{3}{4}f_{(n+\frac{2}{3})}$ de (3.60):

$$\begin{aligned} \frac{1}{4}f_n + \frac{3}{4}f_{(n+\frac{2}{3})} &= f_n + \frac{\Delta t}{2}ff' + \frac{\Delta t^2}{6}\left(f(f')^2 + f^2f''\right) + \Delta t^3\left(\frac{1}{36}f^2f'f''\right) \\ &\quad + \frac{1}{27}ff'f'' + \frac{1}{27}f^3f''' + \frac{\Delta t^4}{54}\left(\frac{1}{6}f^3f'f''' + f^2(f')^2f''\right) \end{aligned} \quad (6.86)$$

Ahora partiendo de Euler progresivo:

$$\frac{a^{n+1} - a^n}{\Delta t} = f(a^n)$$

Expandimos en Series de Taylor $f(a^n)$:

$$\frac{a^{n+1} - a^n}{\Delta t} = a^n + \Delta t \frac{d(a^n)}{dt} + \frac{1}{2}\Delta t^2 \frac{d^2}{dt^2}(a^n) + \frac{1}{6}\Delta t^3 \frac{d^3}{dt^3}(a^n) + \frac{1}{24}\Delta t^4 \frac{d^4}{dt^4}(a^n) + \dots \quad (6.87)$$

Posteriormente dividiendo (6.87) por Δt obtenemos:

$$\frac{a^{n+1} - a^n}{\Delta t} = \frac{d}{dt}(a^n) + \frac{1}{2}\Delta t \frac{d^2}{dt^2}(a^n) + \frac{1}{6}\Delta t^2 \frac{d^3}{dt^3}(a^n) + \frac{1}{24}\Delta t^3 \frac{d^4}{dt^4}(a^n) + \dots \quad (6.88)$$

Por definición:

$$\frac{da^n}{dt} = f(a^n) = f_n$$

Utilizando la regla de la cadena (6.88) se reescribe :

$$\begin{aligned} \frac{a^{n+1} - a^n}{\Delta t} &= f_n + \frac{\Delta t}{2}\left(f'f\right) + \frac{\Delta t^2}{6}\left(f''f^2 + f(f')^3\right) \\ &\quad + \frac{\Delta t^3}{24}\left(f'''f^3 + 4f^2f'f'' + f(f')^3\right) \end{aligned} \quad (6.89)$$