



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA
CENTRO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA

*Desarrollo y evaluación de
parametrizaciones de procesos microfísicos en nubes calientes
empleando la metodología de funciones base*

Tesis

**QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS DE LA TIERRA**

PRESENTA:

Camilo Fernando Rodríguez Genó

TUTOR:

Dr. Léster Augusto Alfonso Díaz

Universidad Autónoma de la Ciudad de México

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., agosto de 2021



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.

I. Resumen

En este trabajo se presenta la aplicación la metodología de funciones base para el desarrollo e implementación de parametrizaciones de procesos microfísicos que tienen lugar en el interior de las nubes calientes: crecimiento de gotas por condensación, colisión-coalescencia y sedimentación gravitacional. De manera general, la metodología de funciones base representa un híbrido entre los modelos parametrizados tradicionales y la microfísica explícita. Al calcular la evolución de los parámetros de las funciones de distribución involucradas a partir de los cambios en los momentos totales, este tipo de modelos permite la variación de la totalidad de los parámetros, sin necesidad de fijar ninguno para cerrar el sistema de ecuaciones, como es el caso de la distribución gamma en esquemas de dos momentos. Además, al contar con todos los parámetros actualizados permite un seguimiento adecuado del espectro de gotas en lugar de momentos específicos representativos de variables físicas. También, en el marco de esta metodología, no hay necesidad de una división artificial del espectro de gotas, por lo que los términos gotas de nubes y gotas de lluvia pierden significado, ya que sólo hay “gotas”. Adicionalmente, se aplicó la metodología de Machine Learning en el desarrollo de un modelo parametrizado de colisión-coalescencia, permitiendo una mayor precisión en los resultados y un menor costo computacional. La parametrización del proceso de sedimentación establece el marco dinámico para la metodología de funciones base. Todas las parametrizaciones fueron comparadas con modelos explícitos, dando resultados con un alto grado de precisión, por lo que es posible la integración de un modelo de nubes basado en funciones base con modelos numéricos climáticos y regionales, ya que las condiciones iniciales que emplea son las mismas que deben ser utilizadas en parametrizaciones microfísicas tradicionales actualmente en uso.

II. Abstract

In the present work, the application of the base functions methodology for the development and implementation of parametrizations of microphysical processes that take place inside warm clouds is presented: droplet growth by condensation, collision-coalescence and gravitational sedimentation. In general, the base functions methodology represents a hybrid between traditional parameterized models and explicit microphysics. By calculating the evolution of the parameters of the distribution functions involved from the tendencies of the total moments, this type of model allows the variation of all the distribution parameters, without the need to set any parameter fixed in order to close the system of equations, such as the case of the gamma distribution in traditional two-moment schemes. In addition, having all the updated parameters allows an adequate monitoring of the spectrum of drops instead of specific moments representative of physical variables. Also, within the framework of this methodology, there is no need for an artificial division of the droplet spectrum, so the terms cloud droplets and raindrops lose meaning, since there are only "droplets". Additionally, Machine Learning methodology was applied in the development of a parameterized collision-coalescence model, allowing greater precision in the results and a lower computational cost. The parameterization of the sedimentation process establishes the dynamic framework for the base functions methodology. All the parameterizations were compared with explicit models, giving results with a high degree of precision, so it is possible to integrate a cloud model based on base functions with climate and regional numerical models, since the initial conditions used are the same that should be used in traditional microphysical parameterizations currently in use.

III. Tabla de Contenidos

I.	Resumen.....	i
II.	Abstract.....	ii
III.	Tabla de Contenidos.....	iii
1.	Introducción.....	1
1.1.	Procesos para la formación de nubes y precipitación.....	1
1.2.	Parametrización de los procesos de formación de lluvia en nubes líquidas.....	2
1.3.	Planteamiento del problema de investigación.....	4
1.4.	Hipótesis de investigación.....	4
1.5.	Estructura de la tesis.....	5
2.	Marco teórico y estado del arte.....	6
2.1.	Microfísica explícita: modelo <i>bin</i> y método de los momentos.....	6
2.1.1.	Modelo microfísico tipo <i>bin</i>	7
2.1.2.	Método de los momentos.....	9
2.2.	Esquemas parametrizados tipo <i>bulk</i>	10
2.2.1.	Sistema de ecuaciones para los momentos estadísticos de las funciones de distribución.....	10
2.2.2.	Aproximación de las distribuciones por tamaños empleando funciones maestras.....	11
2.2.3.	Técnicas empleadas para mejorar el comportamiento de los esquemas tipo <i>bulk</i>	13
2.3.	Representación de los procesos microfísicos en modelos explícitos y parametrizaciones tipo <i>bulk</i>	13
2.3.1.	Crecimiento de gotas por condensación.....	14
2.3.1.1.	Representación de la condensación en microfísica explícita.....	15
2.3.1.2.	Representación de la condensación en esquemas <i>bulk</i>	16
2.3.2.	Desarrollo del espectro de gotas por colisión-coalescencia.....	17
2.3.2.1.	Colisión-coalescencia en microfísica explícita.....	17
2.3.2.2.	Colisión-coalescencia en parametrizaciones <i>bulk</i>	18
2.3.3.	Sedimentación gravitacional de gotas.....	21
2.3.3.1.	Sedimentación en microfísica explícita.....	21
2.3.3.2.	Sedimentación en modelos <i>bulk</i>	22
3.	Metodología de investigación.....	26
3.1.	Formulación y metodología de funciones base.....	26

3.2.	Cálculo de las tendencias de los momentos totales de la distribución	28
3.2.1.	Formulación del proceso de condensación	28
3.2.1.1.	Esquema de integración numérica para condensación	29
3.2.1.2.	Modelo explícito de condensación	30
3.2.1.3.	Condiciones iniciales para la parametrización de condensación	31
3.2.2.	Tendencias de los momentos totales por colisión-coalescencia	31
3.2.2.1.	Machine Learning y Redes Neuronales	33
3.2.2.2.	Arquitectura de las Redes Neuronales	33
3.2.2.3.	Creación de las bases de datos de entrenamiento y validación	36
3.2.2.4.	Entrenamiento y validación de las redes neuronales	39
3.2.2.5.	Modelo explícito de colisión-coalescencia	43
3.2.2.6.	Condiciones iniciales para la parametrización de colisión-coalescencia	44
3.2.3.	Tendencias de los momentos totales por sedimentación	45
3.2.3.1.	Modelo explícito de sedimentación	47
3.2.3.2.	Condiciones iniciales de la parametrización de sedimentación	47
3.2.3.3.	Diseño de experimentos de la parametrización de sedimentación	48
3.3.	Número de condición del sistema de ecuaciones	49
4.	Resultados y discusión	52
4.1.	Resultados de la parametrización de condensación	52
4.2.	Resultados de la parametrización de colisión-coalescencia	55
4.2.1.	Comparación de los espectros de gotas de la parametrización de colisión-coalescencia	55
4.2.2.	Comparación de las cantidades totales de la parametrización de colisión-coalescencia	58
4.2.3.	Errores en el cálculo de los momentos totales por colisión-coalescencia	61
4.3.	Resultados de la parametrización de sedimentación	63
4.3.1.	Comparación de los espectros de gotas con la solución de referencia correspondiente	64
4.3.2.	Comparación de los perfiles verticales de las cantidades totales con la solución de referencia correspondiente	65
4.3.3.	Comparación de los espectros de gotas con la solución de referencia compleja	68
4.3.4.	Comparación de los perfiles verticales de las cantidades totales con la solución de referencia compleja	71
4.3.5.	Errores en el cálculo de los momentos totales por sedimentación	76
4.4.	Perspectivas de acoplamiento de los diferentes procesos microfísicos en el marco de la metodología de funciones base	80
4.4.1.	Estabilidad numérica del sistema de ecuaciones	80

4.4.2. Sobre el acoplamiento	82
5. Conclusiones	84
6. Bibliografía	88

1. Introducción

En la actualidad, los productos de los modelos numéricos para el pronóstico del tiempo son un instrumento fundamental para los pronosticadores, investigadores, tomadores de decisiones y usuarios en forma general, debido a los procesos físicos que contemplan, el nivel de exactitud alcanzado y la información que brindan. Además, dichos modelos constituyen una herramienta de vital importancia para la investigación del comportamiento de la atmósfera en todas las escalas (microescala, mesoescala, escala sinóptica y escala global). Esto ha llevado a la formación a nivel mundial de científicos y especialistas dedicados a su investigación y desarrollo, con el objetivo de obtener una mejor calidad del pronóstico y un mayor entendimiento del comportamiento de la atmósfera.

Uno de los procesos más estudiados en el ámbito de modelación numérica del tiempo son los mecanismos de formación de la precipitación. La modelación conduce a una mejor comprensión de los procesos físicos que dan inicio a la formación de nubes y precipitación, pero en muchos casos la demanda de recursos computacionales para resolver numéricamente los sistemas de ecuaciones físico-matemáticas que caracterizan la dinámica de la atmósfera es muy exigente, por lo que se recurre a la parametrización de dichos procesos. Los modelos parametrizados representan una simplificación de estos sistemas de ecuaciones y, por lo tanto, de lo que ocurre realmente en la atmósfera. Esto introduce numerosos factores de error debido a la simplificación de estos procesos. Por ello requieren menos recursos de cómputo para su resolución, lo que es fundamental para realizar pronósticos del estado de la atmósfera en tiempo y con un grado de exactitud adecuado. Recientemente y debido a la necesidad de representar cada vez mejor los procesos de formación de nubes y precipitación, se ha hecho un esfuerzo considerable en desarrollar parametrizaciones cada vez más precisas y complejas de procesos en escalas cada vez menores (microescala y mesoescala) como parte de los Modelos de Circulación General (*MCG*) (Grabowski, 2003, 2006; Grabowski & Smolarkiewicz, 1999; F. Tao et al., 2009; W. Tao & Moncrieff, 2009).

1.1. Procesos para la formación de nubes y precipitación

Basándonos en los rangos de temperaturas, el estado de agregación del agua y los mecanismos que originan la precipitación en el interior de las nubes, la lluvia puede ser clasificada como “cálida” y “fría”, definiéndose la primera como aquella que no incluye la presencia de la fase sólida del

agua en el desarrollo de la precipitación. Sin embargo, las nubes pueden tener ambos procesos de formación de lluvia actuando de manera simultánea (nubes mixtas). En esta investigación sólo se tratarán los procesos microfísicos responsables del desarrollo del espectro de gotas en nubes líquidas que se deben tener en cuenta en una parametrización, los cuales se enumeran a continuación (Khain et al., 2015):

- Condensación: Crecimiento de las gotas por la difusión de vapor de agua sobre la superficie. Este proceso es vital en el desarrollo inicial del espectro de gotas.
- Colisión-coalescencia: Este se basa fundamentalmente en la diferencia de masas (y por lo tanto de velocidad de caída) entre las gotitas de nube y las gotas de lluvia.
- Sedimentación gravitacional: Las gotas caen debido a la fuerza de gravedad con una velocidad terminal correspondiente con su tamaño y masa.

1.2. Parametrización de los procesos de formación de lluvia en nubes líquidas

De manera general, existen dos enfoques fundamentales para simular los fenómenos microfísicos que ocurren en el interior de una nube líquida. El más exacto se basa en la evolución temporal de la distribución de gotas por tamaños (DSD por sus siglas en inglés). Este enfoque (comúnmente conocido como *bin* o método explícito), tiene como objetivo calcular de la forma más precisa posible los distintos procesos microfísicos, separando el espectro de gotas y colocándolo en una rejilla previamente diseñada (usualmente en función del radio o la masa de las gotas), compuesta por puntos de rejilla o *bins*. Las gotas en esta rejilla son sometidas a la influencia de distintos procesos como son la advección, el crecimiento de gotas por condensación, colisión-coalescencia, sedimentación, etc., resolviendo de forma explícita las ecuaciones microfísicas correspondientes. Por ello, no es necesario un conocimiento previo de la forma que toma la DSD. Las ecuaciones usadas en esquemas de microfísica explícita no están restringidas a situaciones meteorológicas específicas, por lo que una gran ventaja de este tipo de modelos es su portabilidad, ya que el mismo esquema puede ser usado sin modificarse en un amplio rango de simulaciones de fenómenos atmosféricos. Este enfoque es extremadamente preciso, pero su formulación es altamente compleja, por lo que su costo computacional es elevado. Por estas razones, este enfoque es raramente usado en la predicción numérica del tiempo en forma operativa. Ejemplos de este tipo

de modelos son los desarrollados por (Berry, 1967; Berry & Reinhardt, 1974a; Bott, 1998; Khain et al., 2010).

El segundo enfoque (comúnmente conocido como *bulk*), representa de forma general las propiedades microfísicas de las nubes empleando una descripción matemática de las DSD. El primero de estos esquemas fue desarrollado por (Kessler, 1969), empleando una manera simple pero efectiva de representar el proceso de autoconversión. Este tipo de esquemas son computacionalmente eficientes, principalmente porque no se encuentran enfocados en el desarrollo de la DSD, sino en la evolución de un conjunto de momentos estadísticos representativos. Normalmente se emplean uno o dos momentos, tales como (Cohard & Pinty, 2000; Lim & Hong, 2010; Morrison et al., 2009; G. Thompson et al., 2008), y más recientemente se ha extendido su uso a 3 momentos (Huang, 2014; Milbrandt & Yau, 2005a). La principal desventaja de este tipo de enfoque es que las ecuaciones para resolver las tendencias del momento p -ésimo incluyen momentos de un orden superior, por lo que el sistema de ecuaciones no está cerrado (Seifert & Beheng, 2001). Esto se evita empleando parámetros predefinidos para las distribuciones que describen la DSD, que normalmente toman la forma de distribuciones de tipo exponencial, gamma o log-normal. Además, en este enfoque, el espectro de gotas comúnmente se separa de forma artificial en categorías, tales como gotas de nube y lluvia, con un umbral de clasificación que varía entre $20 \mu m$ (Khairoutdinov & Kogan, 2000; Wood & Blossey, 2005) y $40 \mu m$ de radio (Beheng, 2010; Cohard & Pinty, 2000).

Con el objetivo de evitar estas y otras limitaciones, es posible usar un tercer tipo de parametrización. Este enfoque simula el enfoque explícito al describir la evolución de la DSD a través de una combinación lineal de funciones base (Clark, 1976; Clark & Hall, 1983). En este esquema, se resuelve un sistema de ecuaciones para calcular las tendencias de los parámetros de las distribuciones, describiendo de esta forma su evolución debido a los procesos de condensación y colisión-coalescencia. Como el proceso de integración abarca todo el dominio, entonces no es necesario separar de forma artificial el espectro de gotas (los términos gotas de nube y gotas de lluvia pierden significado), y es posible resolver un sistema de ecuaciones determinado sin necesidad de mantener constante ningún parámetro de la distribución. Otra de las ventajas de este enfoque es su independencia de un tipo de kernel de colisión específico, como es común en el enfoque *bulk*, donde, con el objetivo de obtener expresiones analíticas, se usa frecuentemente un

kernel de tipo polinomial (Long, 1974) . Sin embargo, el no contar con una formulación para el proceso de sedimentación gravitacional de gotas, y por ende carecer de un marco dinámico, constituye una gran desventaja respecto a otros métodos microfísicos. Otra limitante de la formulación de funciones base radica en que las tendencias totales de los momentos de las distribuciones involucradas deben ser calculadas para actualizar los valores de los parámetros de las DSD, lo que conlleva a la resolución de un número de integrales proporcional a la cantidad de funciones de distribución empleadas. Dichas integrales deben resueltas numéricamente para cada parámetro y paso de tiempo, o ser calculadas previamente y almacenadas en tablas de búsqueda que deben ser consultadas cada vez que sea requerido por la parametrización, lo cual es costoso computacionalmente e inexacto debido a la naturaleza de los métodos de interpolación empleados en las tablas de búsqueda.

Una alternativa viable para la solución de esta limitante es la aplicación de la metodología de Machine Learning (ML) para simular los resultados de las tendencias de los momentos totales de las funciones de distribución. Aplicando este enfoque, se podrían emplear varias redes neuronales (NN por sus siglas en inglés) para replicar el cálculo de las integrales que se encuentran incluidas en la formulación del esquema de funciones base, acelerando la resolución de las integrales sin sacrificar la precisión de los resultados.

1.3. Planteamiento del problema de investigación

De lo expuesto anteriormente, se puede concluir que el método de funciones base presenta ventajas en su formulación que le permiten superar las limitaciones de los métodos de microfísica *bulk* respecto al cálculo de la evolución y comportamiento de las distribuciones de gotas producto de los procesos de condensación y colisión-coalescencia. Por ello se plantea como problema de investigación la siguiente pregunta:

¿La metodología de funciones base representa una alternativa viable y precisa para parametrizar los procesos microfísicos que ocurren en las nubes líquidas?

1.4. Hipótesis de investigación

En base al problema de investigación planteado, surge la siguiente hipótesis:

Mediante un análisis detallado de la formulación de los procesos microfísicos de condensación, colisión-coalescencia y sedimentación gravitacional de gotas, empleando la metodología de

funciones base, se logrará una representación integral y precisa de las nubes líquidas, superando las limitaciones de los esquemas parametrizados tradicionales.

Así, el *Objetivo General* del presente estudio es:

Objetivo General:

Analizar y evaluar la metodología de funciones base para su uso en esquemas microfísicos de nubes líquidas, a partir de su comparación con un esquema explícito.

Para alcanzar dicho objetivo, se proponen las siguientes metas específicas:

- Asimilar la metodología de funciones base aplicada a los procesos microfísicos en nubes líquidas.
- Implementar la formulación de los procesos de condensación y colisión-coalescencia, y evaluar sus resultados a través de la comparación con un método explícito.
- Desarrollar un marco dinámico basado en la metodología de funciones base, formulando un esquema parametrizado para el proceso de sedimentación gravitacional de gotas.
- Actualizar la formulación del proceso de colisión coalescencia, aplicando la metodología de Machine Learning.

1.5. Estructura de la tesis

El presente trabajo de tesis está estructurado como se muestra a continuación: el Capítulo 2 aborda el marco teórico y estado del arte de la rama de microfísica de nubes calientes; el Capítulo 3 describe el desarrollo, formulación e implementación de la metodología de funciones base para los procesos de condensación, colisión-coalescencia y sedimentación gravitacional de gotas; en el Capítulo 4 se exponen y analizan los resultados obtenidos de los diferentes modelos parametrizados desarrollados, estableciendo su precisión, ventajas y desventajas; en el Capítulo 5 se obtienen algunas conclusiones producto del análisis de los resultados; mientras que el Capítulo 6 incluye la bibliografía empleada para elaborar el trabajo de tesis.

2. Marco teórico y estado del arte

En este capítulo se expondrá el marco teórico en el que se basan las parametrizaciones microfísicas, enfocándose en los procesos de condensación, colisión-coalescencia y sedimentación gravitacional de gotas. Se abordarán las bases, técnicas y características de las parametrizaciones de nubes líquidas.

2.1. Microfísica explícita: modelo *bin* y método de los momentos

La ecuación cinética para la evolución de la distribución $f_k(m)$ correspondiente al hidrometeoro k empleada en los modelos de microfísica explícita puede ser expresada de la siguiente forma (Khain et al., 2015):

$$\frac{\partial \rho f_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u f_k}{\partial x} + \frac{\partial \rho v f_k}{\partial y} + \frac{\partial \rho (w - V_t(m)) f_k}{\partial z} = \left(\frac{\delta f_k}{\delta t} \right)_{nucl} + \left(\frac{\delta f_k}{\delta t} \right)_{cond} + \left(\frac{\delta f_k}{\delta t} \right)_{d/s} + \left(\frac{\delta f_k}{\delta t} \right)_{f/m} + \left(\frac{\delta f_k}{\delta t} \right)_{col} + \dots + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial \rho f_k}{\partial x_j} \right)$$

donde u , v y w son las componentes de la velocidad del viento, V_t es la velocidad terminal que depende de la masa de la partícula, el tipo de hidrometeoro y la densidad del aire ρ . Los términos del miembro derecho de la ecuación corresponden a las tasas de producción de los distintos procesos microfísicos tales como nucleación, condensación, evaporación, congelación, fusión, colisión y coalescencia, etc. El último término corresponde a la mezcla turbulenta, empleando el coeficiente de turbulencia K . El presente trabajo abarca los procesos de condensación, colisión-coalescencia y sedimentación gravitacional de gotas, por lo que la ecuación anterior se reduce a los siguientes términos:

$$\frac{\partial \rho f_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho (w - V_t(m)) f_k}{\partial z} = \left(\frac{\delta f_k}{\delta t} \right)_{cond} + \left(\frac{\delta f_k}{\delta t} \right)_{col} \quad (1)$$

Para calcular la evolución de la distribución según la ecuación (1), se emplean principalmente dos esquemas. Ellos son el modelo microfísico tipo *bin* (BM por sus siglas en inglés) y el método microfísico de los momentos (MMM) respectivamente.

2.1.1. Modelo microfísico tipo *bin*

A través de este método, la distribución $f_k(m)$ es definida por una rejilla de masa logarítmica que contiene un cierto número de secciones (o *bins*) (Berry, 1967). Uno de los parámetros más importantes para la construcción de la malla es la razón $m_{i+1}/m_i = \alpha = const$ (Berry & Reinhardt, 1974a), donde la mayoría de los modelos de este tipo lo considera $\alpha = 2$, dependiendo del problema a solucionar y al número de secciones deseadas. La gran ventaja que presenta este diseño de rejilla es que su resolución es mayor para las partículas más pequeñas, y disminuye de manera gradual a medida que se incrementa la masa de la partícula. La concentración de las gotas N y el contenido de agua líquida (masa) LWC , pueden ser calculados integrando los momentos de orden 0 y 1 de la distribución en función de la masa:

$$N = \int_{m_0}^{m_n} f(m)dm; LWC = \int_{m_0}^{m_n} mf(m)dm \quad (2)$$

Además, es conveniente definir otra distribución $g(\ln r)$ siguiendo la siguiente normalización para una mejor representación en rejillas logarítmicas (Berry & Reinhardt, 1974a):

$$LWC = \int_{\ln r_0}^{\ln r_n} g(\ln r)d \ln r \quad (3)$$

siendo r el radio equivalente de la esfera de masa m . Las funciones de la distribución $f(m)$ y $g(\ln r)$ se relacionan de la forma $g(\ln r) = 3m^2f(m)$ (Berry, 1967). La representación en diferencias finitas de dicha relación queda expresada como (Berry & Reinhardt, 1974a):

$$G_i \equiv g(\ln r_i) = 3m_i^2f(m_i) \quad (4)$$

donde i es un número entero que representa la sección o *bin* correspondiente. Entonces la representación en diferencias finitas de la ecuación (3) en una rejilla logarítmica equidistante significaría que $\ln r = \ln r_{i+1} - \ln r_i = \ln \frac{r_{i+1}}{r_i} = \ln \alpha^{\frac{1}{3}} = \frac{1}{3} \ln \alpha = const$. Por lo tanto, la concentración y el contenido de agua líquida pueden ser expresados sencillamente como $N_i = \frac{1}{3} \ln \alpha \frac{G_i}{m_i}$ y $LWC_i = \frac{1}{3} \ln \alpha G_i$ respectivamente. La concentración total y la masa total pueden ser calculadas como la suma de sus valores correspondientes en todas las secciones:

$$N = \frac{1}{3} \ln \alpha \sum_i \frac{G_i}{m_i}; M = \frac{1}{3} \ln \alpha \sum_i G_i \quad (5)$$

Esta forma de representar la distribución de manera discreta en una rejilla de masa es fácil de incorporar a simulaciones numéricas. La ecuación (5) relaciona únicamente la concentración numérica y la masa presente en las secciones de la rejilla. Así, aplicando lo anterior a la ecuación (1), la ecuación cinética para la distribución en una rejilla de masa puede ser representada por un sistema de ecuaciones para los valores de la distribución en la sección i -ésima (Khain et al., 2015):

$$\frac{\partial \rho f_{i,k}}{\partial t} + \frac{\partial \rho(w - V_t(m_i)) f_{i,k}}{\partial z} = \left(\frac{\delta f_{i,k}}{\delta t} \right)_{cond} + \left(\frac{\delta f_{i,k}}{\delta t} \right)_{col} \quad (6)$$

La característica fundamental en este tipo de esquemas explícitos es la masa de la gota. Realmente, gotas de la misma masa poseen diferentes características tales como densidad, salinidad, etc., por lo que deberían ser categorizadas por otros parámetros. Sin embargo, el enfoque típico empleado en modelos de nube es promediar los valores de dichos parámetros para las partículas ubicadas en determinada sección de la rejilla. Con esta simplificación, todos los parámetros de las partículas tales como densidad o radio equivalente pueden ser expresados a través de la masa empleando relaciones empíricas (Pruppacher & Klett, 2010). Por lo tanto, la distribución de un hidrometeoro determinado se considera unidimensional, dependiendo únicamente de la masa de la partícula o gota, siendo el número total de ecuaciones para las distribuciones igual al número de secciones en que está dividida la rejilla multiplicado por la cantidad de hidrometeoros de diferentes clases. Asimismo, es posible transformar la distribución por masa de las gotas en función del radio y el logaritmo del radio, de acuerdo a las siguientes expresiones (Berry, 1967), considerando que las distribuciones estadísticas son diferenciales exactas por definición:

$$f(m) = \frac{r}{3m} f(r) \quad (7a)$$

$$f(m) = \frac{1}{m} f(\ln x) \quad (7b)$$

$$f(m) = \frac{1}{3m} f(\ln r) \quad (7c)$$

Además, es conveniente definir la función de densidad de masa $g(\ln r)$ en función de la distribución (Berry, 1967):

$$g(\ln r) = mf(\ln r) \quad (8)$$

La ventaja de este método es su sencillez, ya que puede ser fácilmente modificado para añadir nuevas características, tipos de hidrometeoros o nuevos parámetros para las gotas y partículas que componen una nube. Además, permite la utilización de cualquier tipo de kernel de colisión, ya sea polinomial o de otro tipo. Estas ventajas explican la amplia implementación de diferentes tipos de parametrizaciones de microfísica explícita tipo *bin* en modelos a escala de nube, así como en modelos regionales y de mesoescala como el *Weather Reasearch and Forecasting (WRF)* (Khain & Lynn, 2009), *Goddard Cumulus Ensemble (GCE)* (Li et al., 2009a, 2009b; Zhou et al., 2007), entre otros.

2.1.2. Método de los momentos

En el método de los momentos (MMM), el eje de masa es separado en categorías, de tal manera que las fronteras de cada una forman una rejilla logarítmica equidistante. En cada categoría la distribución es caracterizada por un determinado número de momentos de la distribución, por ejemplo, contenido de agua y concentración numérica (Feingold et al., 1988; Tzivion et al., 1987). Por lo tanto, las ecuaciones para cada categoría no son formuladas para la distribución, sino para sus momentos estadísticos, que son definidos a partir de una distribución en función de la masa como:

$$M_i^{(p)} = \int_{m_i}^{m_{i+1}} m^p f(m) dm \quad (9)$$

por lo que el momento de orden cero $M_i^{(0)}$ representa la concentración numérica para la i -ésima sección, el momento de orden 1 $M_i^{(1)}$ está relacionado con la masa, y el momento de orden 3 $M_i^{(3)}$ es proporcional a la reflectividad. Si la función de distribución que describe el DSD es dependiente del radio, el orden de los momentos representativos son 0, 3 y 6, correspondientes a concentración, masa y reflectividad, respectivamente. Para calcular estas integrales, es necesario realizar cierto número de suposiciones sobre el comportamiento de la distribución dentro de cada categoría: son consideradas continuas y se asume que presentan una relación lineal con la masa. Varios autores han resuelto sistemas de ecuaciones para calcular la concentración y masa de acuerdo a los momentos de la distribución para cada categoría (Jung et al., 2010; Saleeby & Cotton, 2004; Teller & Levin, 2008; Tzivion et al., 1987; Yin et al., 2000). La forma de las ecuaciones es similar a la

ecuación (6). Para calcular la concentración y masa de un hidrometeoro determinado, el MMM emplea un esquema numérico análogo al método de los trapecios para resolver las integrales expresadas en la ecuación (2).

El número de ecuaciones en el método de los momentos es igual al producto del número de hidrometeoros, el número de categorías y el número de momentos estadísticos calculados en cada categoría. El MMM usualmente resuelve dos ecuaciones para los momentos en cada categoría, por lo que opera con el doble de variables que el método *bin*. Con el objetivo de simplificar las operaciones, normalmente se emplea un kernel de colisión hidrodinámico (Hall, 1980; Low & List, 1982a, 1982b).

La metodología del MMM ha sido empleada en el estudio de nubes orográficas (Jung et al., 2010) y convección tropical profunda (Min et al., 2012), entre otros (Carneiro et al., 2018; Harrington et al., 2021; Jiang et al., 2021; Shen et al., 2020).

2.2. Esquemas parametrizados tipo *bulk*

En esta sección se presentarán los avances recientes respecto a los esquemas de parametrización microfísica tipo *bulk*.

2.2.1. Sistema de ecuaciones para los momentos estadísticos de las funciones de distribución

Al multiplicar la ecuación (1) por m^p e integrar sobre la masa, se obtiene el sistema de ecuaciones para el momento p -ésimo de la distribución por masa para el meteoro i , $M_i^{(p)} = \int_0^\infty m^p f(m) dm$:

$$\frac{\partial \rho M_k^{(p)}}{\partial t} + \frac{\partial \rho (w - \bar{V}_{t,k}^{(p)}) M_k^{(p)}}{\partial z} = \left(\frac{\delta M_k^{(p)}}{\delta t} \right)_{cond} + \left(\frac{\delta M_k^{(p)}}{\delta t} \right)_{col} \quad (10)$$

donde $\bar{V}_{t,k}^{(p)} = \frac{1}{M_k^{(p)}} \int m^p f(m) V_{t,k}(m) dm$ es la velocidad terminal ponderada por el momento p -ésimo del DSD. El significado físico de la ecuación (10) es similar a la ecuación (1), pero las razones de cambio debido a los procesos microfísicos están formulados para los momentos estadísticos del DSD. La cantidad de ecuaciones de (10) es igual al número de momentos empleados multiplicado por el número de clases de hidrometeoros considerados en el esquema parametrizado. Por lo tanto, el número de ecuaciones en un esquema *bulk* típico es al menos un

orden de magnitud menor que en un esquema explícito, lo que lo hace ideal para su uso en modelo de pronóstico numérico.

Los esquemas *bulk* actuales son más complejos que aquellos desarrollados hace una década. Las parametrizaciones más recientes incluyen más tipos de hidrometeoros y emplean más momentos para describir la DSD. Se puede apreciar la evolución al comparar el número de variables microfísicas empleadas en las distintas parametrizaciones, las cuales varían desde 2 en el esquema desarrollado en (Kessler, 1969) hasta 17 en (Loftus et al., 2014) y 18 en (Milbrandt & Yau, 2005b, 2006).

2.2.2. Aproximación de las distribuciones por tamaños empleando funciones maestras

Los hidrometeoros líquidos usualmente se describen empleando distribuciones de gotas por tamaño (DSD). Inicialmente, Marshall y Palmer caracterizaron las DSD utilizando distribuciones exponenciales basadas en el diámetro de las gotas (Marshall & Palmer, 1948), sin embargo, la inmensa mayoría de los esquemas tipo *bulk* usan la distribución gamma como función maestra para aproximar las distribuciones de los distintos hidrometeoros. Esta distribución tiene la forma siguiente (Seifert & Beheng, 2001):

$$f(m) = N_0 m^v e^{-\lambda m^\mu} \quad (11)$$

donde N_0 es el intercepto, v es el parámetro de forma, λ es la pendiente o el parámetro de escala, y μ es el parámetro de dispersión. Los parámetros v y μ determinan la forma de la distribución para una masa muy pequeña (parámetro de forma inicial) y para masas muy grandes (parámetro de forma final), respectivamente. En algunos casos se emplea como variable independiente el radio r o el diámetro efectivo D en lugar de la masa. En estos, casos la distribución puede expresarse como (Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010; Schoenberg Ferrier, 1994):

$$f(D) = N'_0 D^{v'} e^{-\lambda' D^{\mu'}} \quad (12)$$

En el caso de una relación uno a uno entre el radio y la masa, así como para partículas esféricas, se pueden convertir fácilmente las respectivas distribuciones. Usando la relación $m = \frac{1}{6}\pi\rho D^3$ (siendo ρ la densidad del hidrometeoro), se pueden obtener las siguientes relaciones entre los parámetros de las ecuaciones (11) y (12): $N'_0 = 3N_0 \left(\frac{1}{6}\pi\rho\right)^{v+1}$, $v' = 3v + 2$, $\lambda' = \lambda \left(\frac{1}{6}\pi\rho\right)^\mu$ y $\mu' = 3\mu$ (Khain et al., 2015).

La distribución gamma presentada en la ecuación (11) es igual a cero en $m = 0$, tiene un máximo y posteriormente tiende a cero cuando $m \rightarrow \infty$. Ya que las distribuciones de gotas observadas tienen como regla dos modos, el primero corresponde a gotas de nube con radios menores a 20 – 25 μm y centrado en $r \sim 10 - 15 \mu m$, y el segundo corresponde a gotas de lluvia con radios tan grandes como 3-4 mm en algunas ocasiones (Pruppacher & Klett, 2010). Entonces las distribuciones por tamaño que incluyen gotas de nube y lluvia no pueden ser caracterizadas por una sola distribución. Para evitar este tipo de situaciones, todos los esquemas tipo *bulk*, sin excepción, hacen una distinción arbitraria entre gotas de nube, descritas usualmente por una distribución gamma, y gotas de lluvia, caracterizadas normalmente, aunque no exclusivamente, por una distribución exponencial. En consecuencia, las partículas en estado líquido son representadas por dos tipos de hidrometeoros: gotitas de nube y gotas de lluvia.

Dicha clasificación está argumentada con bases físicas, ya que el proceso de colisión produce un modo de gotas de nube separado de las gotas de lluvia, con un mínimo bien acentuado separando ambos modos, usualmente localizados entre los radios de 25 a 60 μm . Es aceptado que el radio que separa ambos modos es igual a 30 μm . Diversos análisis de datos observacionales han mostrado que la forma de los espectros de partículas en las nubes evoluciona en el tiempo y la altura, de tal forma que todos los parámetros de las distribuciones deben cambiar para preservar la aproximación a los espectros, y que estos cambios están relacionados entre sí (Dooley, 2008; Tampieri & Tomasi, 1976). Estrictamente hablando, para determinar cuatro parámetros en la expresión (11) de una distribución gamma, se requiere la solución de cuatro ecuaciones, por lo que deberían ser usados esquemas tipo *bulk* de cuatro momentos. Sin embargo, los esquemas recientes no usan más de tres momentos, por lo que, en esquemas de uno, dos y tres momentos, hay 3, 2 y 1 parámetros respectivamente que deben ser fijados previamente o calculados empleando relaciones semiempíricas adicionales (Khain et al., 2015; Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010).

A pesar del amplio uso de la distribución gamma en parametrizaciones microfísicas, mediciones de lluvia basadas en las DSD han demostrado que las distribuciones log-normales poseen un mejor ajuste basado en el error cuadrático medio (MSE por sus siglas en inglés) a los datos observados, que las distribuciones gamma o exponenciales (Feingold & Levin, 1986). Este tipo de distribución estadística ha sido utilizada en parametrizaciones microfísicas de nubes líquidas con buenos resultados (Clark, 1976; Clark & Hall, 1983; Feingold et al., 1998; Huang, 2014).

2.2.3. Técnicas empleadas para mejorar el comportamiento de los esquemas tipo *bulk*

Se emplean tres enfoques fundamentales para mejorar la aproximación de las distribuciones a partir de funciones en esquemas de parametrización tipo *bulk*. El primero de ellos es ampliamente usado en esquemas de doble momento, e involucra la implementación de relaciones entre los distintos parámetros de las funciones estadísticas empleadas. Dichas relaciones han sido aplicadas en esquemas microfísicos, y fueron obtenidas de simulaciones empleando esquemas microfísicos explícitos. Por ejemplo, se ha usado la relación entre N_0 y la razón de mezcla de agua de lluvia para describir la DSD de la lluvia (G. Thompson et al., 2004). Nótese que el empleo de estas relaciones entre parámetros de la misma distribución mantiene un solo modo en la misma. Sin embargo, se han hallado espectros bimodales de gotas en observaciones realizadas en nubes tipo estratocúmulo (Korolev, 1994, 1995), y en diversas simulaciones numéricas realizadas (Magaritz et al., 2009, 2010). Por lo tanto, la caracterización de los espectros de gotas a partir de DSD con un solo modo no representa de forma adecuada la estructura microfísica de las nubes y los procesos microfísicos asociados.

El segundo enfoque consiste en implementar modos adicionales en las distribuciones empleadas. Ejemplo de ello es la implementación de un tercer modo adicional para la llovizna, localizado entre los modos correspondientes al agua de nube y agua de lluvia, en el modelo *RAMS* (Saleeby & Cotton, 2004). La implementación de este tercer modo ha dado como resultado la demora del proceso de formación de lluvia y ha conducido a mejoras importantes al ser implementados en simulaciones de nubes tipo estratocúmulo y ser comparados con datos observacionales (Sant et al., 2013). El tercer enfoque consiste en la utilización de esquemas de tres momentos, permitiendo de esta forma el cálculo de tres parámetros en las ecuaciones (9) a (11). Esta variante ha sido aplicada en diversas parametrizaciones (Loftus et al., 2014; Milbrandt & Yau, 2006; Rodríguez-Genó & Alfonso, 2021b).

2.3. Representación de los procesos microfísicos en modelos explícitos y parametrizaciones tipo *bulk*

En las secciones anteriores mostramos que mientras que, en los esquemas explícitos las DSD están representadas por valores en un conjunto de puntos en una rejilla de masa o radio, las parametrizaciones tipo *bulk* utilizan un conjunto de momentos del DSD. Ambos enfoques son legítimos, ya que, de acuerdo con consideraciones teóricas, la DSD se puede representar

completamente por un número infinito de puntos, o por la serie de Gram-Charlier en la que los coeficientes se calculan utilizando un número infinito de momentos del DSD (Cramér, 1999). Se cree que la precisión de la aproximación de PSD aumenta en proporción al número de secciones o el número de momentos. Es razonable esperar que para obtener la misma precisión en la representación de cualquier DSD, el número de momentos debe ser menor que el número de secciones, ya que los momentos describen la mayoría características importantes de la DSD, a saber, el momento cero es la concentración de partículas, el primer momento es la masa media, el segundo momento central caracteriza el ancho de PSD, el tercer momento central describe el asimetría de PSD, el cuarto momento central caracteriza la longitud de la cola de la distribución y nitidez del máximo del DSD, y así sucesivamente. Aquí los momentos centrales son los momentos calculados con respecto al valor medio de distribución. Entonces surge la pregunta de cuántas secciones y cuántos momentos debe utilizarse para obtener una precisión similar en la descripción del DSD y los procesos microfísicos.

Esta sección describe brevemente la representación de los principales procesos microfísicos en esquemas parametrizados explícitos y *bulk*. Significativamente, las tasas de todos los procesos microfísicos dependen grandemente del tamaño de las gotas. La utilización de los momentos del DSD, es decir, cantidades integradas sobre todo el rango de tamaños, conduce a cierta pérdida de sensibilidad de las tasas de cambio al tamaño de partícula.

2.3.1. Crecimiento de gotas por condensación

Después del proceso de nucleación, las gotas recién formadas continúan su crecimiento a través de la difusión de vapor de agua sobre su superficie, lo cual constituye un proceso microfísico esencial en las etapas iniciales de formación de la lluvia. El proceso de condensación de vapor de agua sobre las gotas es un proceso relativamente lento en comparación con la colisión-coalescencia, y determina en gran medida el tiempo de vida de las nubes. El crecimiento de gotas por difusión del vapor de agua está relacionado con la liberación del calor latente de condensación, el cual representa la fuente principal de flotabilidad en las nubes. Un sondeo troposférico típico presenta una estratificación estable respecto a la adiabática seca; por lo tanto, la inestabilidad convectiva sería imposible sin la liberación del calor latente de condensación. Cálculos respecto al balance de calor latente y sensible empleando modelos microfísicos explícitos han demostrado que el calor liberado por condensación sobre las gotas el principal mecanismo responsable de la

flotabilidad y la creación de corrientes ascendentes en nubes convectivas (Khain & Lynn, 2009; W. K. Tao et al., 2012). La tasa de crecimiento de las gotas por condensación es controlada por la sobresaturación, la cual depende de la velocidad vertical y la tasa de absorción de vapor de agua por las gotas de nube.

2.3.1.1. Representación de la condensación en microfísica explícita

El crecimiento de gotas por condensación se calcula a través de las ecuaciones clásicas de difusión de vapor (Pruppacher & Klett, 2010). En los esquemas explícitos modernos, la ecuación de difusión de vapor es resuelta en conjunto con la formulación de la sobresaturación, por lo que dicho valor varía a medida que evoluciona el proceso de difusión.

El problema numérico más serio que sobresale en modelos explícitos con una cantidad limitada de *bins*, es el ensanchamiento artificial del espectro que ocurre al resolver las ecuaciones de difusión de vapor en una rejilla de masa invariable. Dicho problema se asemeja a la dispersión espacial al emplear esquemas de diferencias finitas. En cada subproceso de difusión de vapor, es necesario interpolar la DSD a la rejilla de masa. En el transcurso de esta interpolación, algunas gotas se transfieren a secciones correspondientes a masas mayores a aquellas que resultarían de una solución explícita de la ecuación de crecimiento por difusión de vapor. Eventualmente, este proceso acelera de manera artificial la formación de gotas de lluvia. Algunos esquemas con una alta influencia de este proceso, resultan en una formación acelerada de lluvia en niveles bajos de la atmósfera, incluso en nubes que se desarrollan en un ambiente con una alta concentración de aerosoles (Kovetz & Olund, 1969). Este efecto se ha reducido en versiones recientes de los modelos explícitos para condensación, proponiendo métodos de interpolación que conservan los momentos estadísticos de las DSD, disminuyendo sustancialmente el ensanchamiento artificial del espectro y estableciendo una relación entre la altura y la amplitud de las DSD (Khain et al., 2008).

Otra manera de evitar el ensanchamiento artificial del espectro por condensación es emplear rejillas móviles para representar las DSD. En este método, la masa correspondiente al centro de cada sección de rejilla se incrementa de acuerdo con la ecuación de difusión de vapor. Como este método no requiere interpolación, la descripción del proceso de condensación es muy precisa. Este tipo de esquemas son ampliamente usados en modelos de parcela Lagrangianos (Magaritz et al., 2010; Pinsky et al., 2008; Pinsky & Khain, 2002)

2.3.1.2. Representación de la condensación en esquemas *bulk*

La mayoría de los esquemas tipo *bulk* no emplean una formulación explícita para el crecimiento de gotas por condensación. En su lugar, usualmente se aplica la hipótesis de ajuste de saturación, según la cual la sobresaturación sobre agua es forzada a un valor de 0 al final de cada paso temporal en el modelo (Straka, 2009; W.-K. Tao et al., 1989). El procedimiento típico para el ajuste de sobresaturación es el siguiente. Después del subproceso de advección, se calculan nuevos valores de temperatura T y razón de mezcla q . La razón de mezcla se compara con el valor de saturación $q_s(T)$. Si $q > q_s(T)$ (hay sobresaturación), se realiza un proceso iterativo simple en el cual se reduce q y se incrementa T , por lo que al final del procedimiento $q_{new} = q_s(T_{new})$. A continuación, la diferencia $q - q_{new}$ se añade al contenido de agua líquida y los parámetros de la distribución empleada se actualizan empleando la concentración de gotas obtenida como resultado del proceso de nucleación y el nuevo contenido de agua líquida. Nótese que, en corrientes convectivas ascendentes, la sobresaturación nunca llega a cero, e incluso puede alcanzar varios puntos porcentuales como consecuencia del incremento en la velocidad vertical y la disminución de la concentración de gotas por colisión-coalescencia (Khain et al., 2012; Prabha et al., 2011). La aplicación del ajuste de sobresaturación bajo esas condiciones conlleva a la sobrestimación de la masa condensada en la gota y del calor latente liberado en cada paso temporal, y por lo tanto trae como consecuencia una sobrestimación de la velocidad vertical y la tasa de lluvia convectiva. Además, la sobresaturación en nubes convectivas ascendentes en un ambiente limpio es mayor que en nubes contaminadas. El ajuste de saturación que elimina la sobresaturación afecta la sensibilidad de los esquemas tipo *bulk* a los efectos de los aerosoles.

Una manera de mejorar los resultados de las parametrizaciones tipo *bulk* es evitar el procedimiento de ajuste de saturación (Chen & Liu, 2004). Sin embargo, no todos los modelos microfísicos emplean este procedimiento. En el modelo *RAMS*, por ejemplo, se resuelve directamente la ecuación de difusión de vapor, por lo que la sobresaturación no se fuerza a un valor de cero al final de cada paso temporal, conllevando a una mejor representación de la condensación y liberación de calor latente, especialmente en nubes convectivas profundas. Además, otros procedimientos como la aplicación de un esquema linealizado para el cálculo de la sobresaturación ha permitido la predicción de la sobresaturación en el interior de las nubes, así como una mejor representación de la difusión de vapor en el crecimiento de los hidrometeoros bajo un esquema de dos momentos (Phillips, Donner, et al., 2007).

2.3.2. Desarrollo del espectro de gotas por colisión-coalescencia

La colisión-coalescencia de gotas es uno de los procesos más importantes para el desarrollo del espectro y formación de lluvia.

2.3.2.1. Colisión-coalescencia en microfísica explícita

La evolución del espectro de gotas $f(m)$ debido a colisiones entre gotas líquidas, sin considerar el rompimiento de las mismas, es descrita por la ecuación estocástica de colisión-coalescencia (SCE por sus siglas en inglés) (Pruppacher & Klett, 2010):

$$\frac{df(m, t)}{dt} = \int_0^{m/2} f(m')f(m - m')K(m - m', m')dm' - \int_0^{\infty} f(m)f(m')K(m, m')dm' \quad (13)$$

La primera integral del miembro derecho de la ecuación describe la tasa de generación de gotas de masa m por coalescencia con gotas de masa m' y $m - m'$, mientras que la segunda integral describe la disminución en la concentración de gotas con masa m . El kernel de colisión $K_g(m, m')$ es el kernel hidrodinámico, el cual se define como:

$$K_g(m_1, m_2) = \frac{\pi}{4} (D_1 + D_2)^2 E(m_1, m_2) |V_{t1} - V_{t2}| \quad (14)$$

donde $E(m_1, m_2)$ representa la eficiencia de colección entre dos gotas de masa m_1 y m_2 . En todos los esquemas de microfísica explícita las colisiones son calculadas resolviendo la ecuación (13). El kernel de colisión $K_g(m, m')$ depende de la masa de la gota colectora, y por lo tanto, del tamaño. Este kernel de colisión se basa en la diferencia de velocidades de caída que ocurre con la disminución de la densidad del aire. Se ha demostrado que un incremento en la diferencia de las velocidades terminales conduce a un aumento en la eficiencia de colisión. Como consecuencia de ello, para algunos pares de gotas, el kernel de colisión a una altitud de 5 a 6 km es el doble que en la superficie.

Existen varios métodos para resolver el SCE (Khain et al., 2000; Straka, 2009), siendo uno de los más conocidos es desarrollado en (Bott, 1998). Estos métodos son bastante precisos y están en concordancia con soluciones analíticas conocidas (Feingold et al., 1988; Golovin, 1963). Como la ecuación (13) es resuelta de manera explícita para todo el espectro, sin separarlo en gotas de nube y lluvia, los problemas relacionados con la autoconversión, acreción, y otros procesos relacionados, no son considerados.

2.3.2.2. Colisión-coalescencia en parametrizaciones *bulk*

La colisión de partículas en el interior de las nubes contempla varios subprocesos que se analizan de manera diferenciada. Estos son:

- Autocolección (sc): Se refiere a las colisiones entre partículas pertenecientes a la misma clase de hidrometeoros que dan como resultado partículas del mismo tipo.
- Autoconversión (aut): Es el proceso en que dos gotitas de nube colisionan, creando una gota de lluvia.
- Acreción (acc): Contempla la colisión de gotas de lluvia con gotitas de nube, conduciendo a un crecimiento de las gotas de lluvia.

Para describir las tasas de producción correspondientes a los procesos microfísicos mencionados, se calcula la evolución de los momentos de la distribución usando la ecuación (13) (Beheng, 2010):

$$\left(\frac{\partial M^{(p)}}{\partial t}\right)_{au} = - \int_{m'=0}^{m^*} \int_{m''=m^*-m'}^{m^*} f(m')f(m'')K(m',m'')(m')^p dm'' dm' \quad (15a)$$

$$\left(\frac{\partial M^{(p)}}{\partial t}\right)_{acc} = - \int_{m'=0}^{m^*} \int_{m''=m^*}^{\infty} f(m')f(m'')K(m',m'')(m')^p dm'' dm' \quad (15b)$$

$$\left(\frac{\partial M^{(p)}}{\partial t}\right)_{sc} = \frac{1}{2} \int_{m'=0}^{m^*} \int_{m''=0}^{m^*-m'} f(m')f(m'')K(m',m'')[(m'+m'')^p - 2(m')^p] dm'' dm' \quad (15c)$$

Las ecuaciones (15a) y (15b) representan los momentos de las distribuciones de las gotas de nube y lluvia correspondientes a la integral de pérdida de la SCE, mientras que la ecuación (15c) representa la integral de ganancia, reflejando la tasa de producción de gotas de lluvia (Khain et al., 2015).

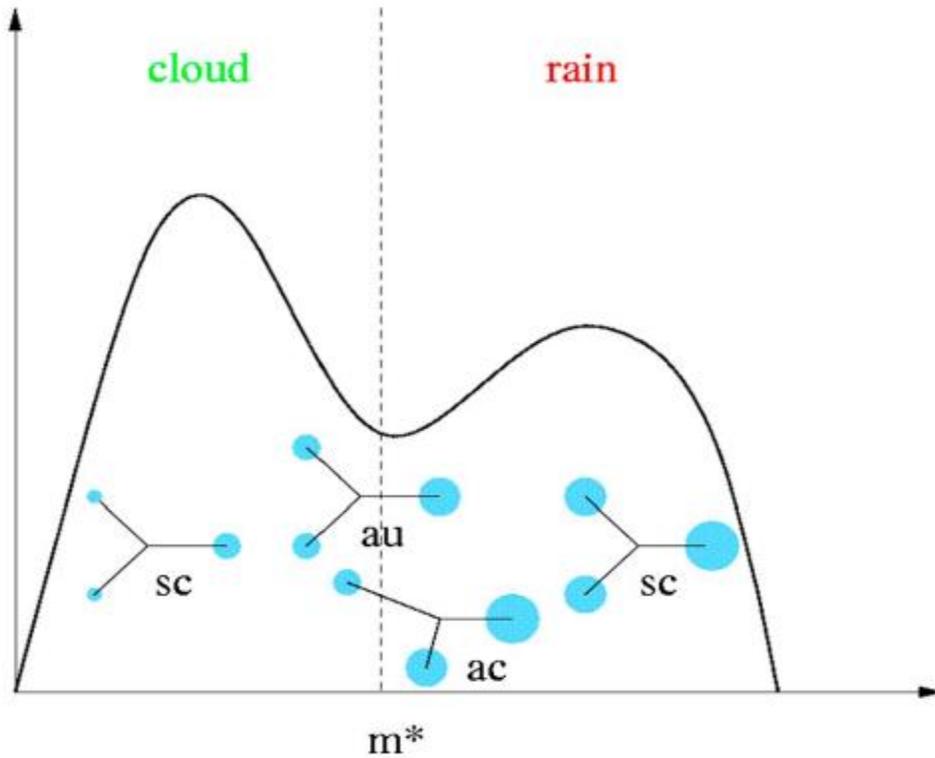


Figura 1: Representación esquemática del espectro de gotas separado en gotas de nube y lluvia, y definición de los subprocesos de colisión-coalescencia.

La formulación del término de autoconversión de forma analítica ha demostrado ser una tarea difícil en el marco de las parametrizaciones tipo *bulk*. Sin embargo, los términos concernientes a la acreción y autocolección son relativamente sencillos de formular. La primera parametrización empírica del proceso de autoconversión proponía que la tasa de producción de agua de lluvia producto de la colisión de gotas es directamente proporcional a la razón de mezcla de las gotas de nube (q_c) (Kessler, 1969).

$$\left(\frac{\partial M^{(1)}}{\partial t}\right)_{au} = \frac{\partial q_r}{\partial t} = \begin{cases} k(q_c - q_{cr}), & \text{si } q_c > q_{cr} \\ 0 & \end{cases} \quad (16)$$

En la ecuación (16), q_c y q_r son los contenidos de agua de nube y de lluvia respectivamente, mientras que k y q_{cr} son parámetros del modelo que deben ser calibrados con el objetivo de simular la formación de la precipitación de diferentes tipos de nubes. El valor umbral q_{cr} normalmente tiene valores que varían en un rango entre 0.5 y 1 gcm^{-3} , mientras que $k = 10^{-3}s^{-1}$ (Straka, 2009). A pesar del hecho de que esta formulación no considera la forma del espectro de gotas, es

ampliamente usada en parametrizaciones tipo *bulk* (Lin et al., 1983; Reisner et al., 1998). Por ello, la ecuación (16) predice tasas de producción de gotas de lluvia similares cuando los contenidos de agua de nube son los mismos, incluso si los espectros de gotas son diferentes. Sin embargo, varios estudios han demostrado que la formación de lluvia depende enormemente de los parámetros de la distribución, incluso teniendo los mismos contenidos de agua (Khain et al., 2015; Straka, 2009). Una de las mayores ventajas de la parametrización de Kessler es su sencillez y fácil implementación en cualquier tipo de simulación, pero precisamente por eso no guarda relación alguna con la solución de la *SCE*. Específicamente, este esquema asume incorrectamente que la eficiencia de colección es independiente del tamaño de las gotas. Por ello se han realizado estudios para mejorar este enfoque; por ejemplo se ha generalizado la ecuación (16) para tener en cuenta de manera explícita la concentración de gotas y la dispersión relativa del espectro de gotas de nube (Liu et al., 2006).

En la mayoría de los esquemas de doble momento, la autoconversión es calculada a partir de la formulación expresada en (Berry & Reinhardt, 1974b). En dicho trabajo se obtuvo una parametrización al analizar cierto número de soluciones numéricas de la ecuación (13), empleando las eficiencias de colisión calculadas en (Hocking & Jonas, 1970); sin embargo, estos valores no son considerados precisos. Los valores de eficiencia de colisión calculados en ese estudio difieren significativamente de aquellos reportados por otros investigadores (Pinsky et al., 2001; Wang et al., 2005). Además, el rango de condiciones empleando en (Berry & Reinhardt, 1974b) fue muy estricto. De hecho, tomaron el espectro inicial de gotas en la forma de una distribución gamma, el radio promedio fue establecido entre de $10 \mu m$ a $18 \mu m$, y el contenido de agua líquida establecido en $1 gm^{-3}$. El tiempo Δt_{aut} en que el radio alcanza los $50 \mu m$ fue calculado durante las simulaciones. La tasa de autoconversión fue establecida como la razón entre el contenido de agua de lluvia y Δt_{aut} . Además, el proceso de autoconversión calculado de esta forma no discrimina entre acreción y autoconversión como tal (Beheng & Doms, 1986).

Ya que dicha parametrización está basada en pocas simulaciones y empleando un solo valor de contenido de agua líquida, los autores recomiendan tener cuidado con posibles extrapolaciones de sus resultados (Berry & Reinhardt, 1974b), sin embargo, en la actualidad existen más de 10 parametrizaciones de este tipo (Gilmore & Straka, 2008). Estos esquemas difieren del original en cuestiones relacionadas con la forma del espectro inicial de gotas y en el uso de diferentes

definiciones de la escala de tiempo característica para la formación de las primeras gotas de lluvia (Cohard & Pinty, 2000; Milbrandt & Yau, 2005a, 2005b). A pesar del hecho de que la mayor parte de las formulaciones desarrolladas para el proceso de autoconversión son aplicables solamente a la etapa inicial de formación de gotas de lluvia, los resultados de las mismas difieren en varios órdenes de magnitud (Gilmore & Straka, 2008). Esto es consecuencia de la naturaleza intrínsecamente no lineal de la *SCE*, donde las tasas dependen de la forma del espectro, su evolución en el tiempo y del contenido de agua.

Sólo Seifert y Beheng han desarrollado un esquema que aborda la producción de gotas de lluvia cuando estas superan los 80 μm de diámetro (Seifert & Beheng, 2001). Con el objetivo de contemplar la evolución en el tiempo del proceso de autoconversión y empleando un kernel de colisión más realista, estos investigadores introdujeron funciones universales que varían con la fracción de masa de las gotas de lluvia respecto al contenido de agua líquida total. Dichas funciones universales fueron obtenidas a través de comparaciones con la solución exacta de la *SCE* empleando un tipo específico de kernel polinomial, conocido como kernel de Long (Long, 1974). En caso de emplear otros tipos de kernel, las expresiones de las funciones universales deben ser reformuladas.

2.3.3. Sedimentación gravitacional de gotas

La sedimentación gravitacional de gotas influye grandemente en la estructura microfísica de las nubes, ya que determina la clasificación de los hidrometeoros respecto a su tamaño (*size sorting*) en la dirección vertical, afectando otros procesos como la colisión-coalescencia y el crecimiento de gotas por condensación. Además, también determina la cantidad de precipitación que llega a la superficie.

2.3.3.1. Sedimentación en microfísica explícita

La sedimentación de gotas en modelos explícitos es calculada de la siguiente forma, de acuerdo a la distribución empleada:

$$\frac{\partial f_{i,k}}{\partial t} = \frac{\partial V_{t,i,k}(z) f_{i,k}}{\partial z} \quad (17)$$

donde $f_{i,k}$ es la DSD del hidrometeoro k , perteneciente a la sección de rejilla (*bin*) i . En modelos explícitos, la velocidad de caída de las gotas $V_{t,i,k}(z)$ depende normalmente del tipo de

hidrometeoro, la masa de las gotas y la densidad del aire (altura). En algunos casos, la velocidad de caída también se relaciona con la composición de las partículas y la rugosidad de la superficie de la partícula (Benmoshe et al., 2012; Phillips et al., 2014, 2015; Phillips, Khain, et al., 2007). La clasificación por tamaños se simula automáticamente ya que gotas de diferentes masas y tamaños caen con distintas velocidades terminales. Además, la viscosidad artificial producto del uso de esquemas de diferencias finitas para aproximar la ecuación (17) puede conducir al hecho de que un número muy pequeño de partículas de gran tamaño sedimenten muy rápido a la superficie.

2.3.3.2. Sedimentación en modelos *bulk*

La sedimentación en parametrizaciones *bulk* no se realiza de manera explícita para gotas individuales, sino que se calcula en base a los momentos de la DSD. Este proceso es descrito por la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial M^{(p)}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{V}_t^{(p)} M^{(p)}}{\partial z} \quad (18)$$

donde $\bar{V}_t^{(p)} = \frac{1}{M^{(p)}} \int m^p f(m) V_t(m) dm$ es la velocidad terminal ponderada. Dicha velocidad cambia en dependencia del orden del momento empleado. En el caso de esquemas de un momento, la sedimentación se calcula para el momento de orden 1 de la DSD, por lo que se utiliza la velocidad terminal ponderada por la masa. El empleo de la ecuación (18) significa que, por ejemplo, para gotas con velocidades terminales entre 0.5 m/s y 10 m/s, la velocidad terminal ponderada por la masa equivale a 3 m/s. Evidentemente, este enfoque no reproduce de manera adecuada la distribución vertical de las gotas en nubes reales, donde las gotas de mayor tamaño sedimentan más rápidamente que las gotas pequeñas. Es posible obtener mejores resultados empleando un esquema parametrizado de dos momentos, donde se emplean dos versiones de la ecuación (18), una ponderada por la concentración numérica de gotas y otra por la masa.

Nótese que, en caso de una velocidad terminal constante, la ecuación (18) representa la ecuación de advección $\frac{\partial M}{\partial t} = -\bar{V}_t \frac{\partial M}{\partial z}$, la cual posee la solución analítica $M(z, t) = M(z - \bar{V}_t t, 0)$. De acuerdo a esta solución, el perfil vertical inicial se traslada hacia abajo en la vertical, sin cambiar la forma del DSD. Nótese también que la velocidad terminal ponderada por la masa debe ser mayor que aquella ponderada por la concentración ($\bar{V}_t^{(1)} > \bar{V}_t^{(0)}$). Esta desigualdad es evidencia de que las partículas más pequeñas caen más lentamente que las grandes. Esta diferencia entre las

velocidades terminales ponderadas por momentos de distinto orden representa un problema, ya que según esta formulación puede existir masa en áreas de la nube donde las concentraciones son despreciables, mientras que, en puntos más altos en la nube, pueden existir valores de concentración con un valor de masa muy cercano a cero. Por lo tanto, los radios medios de las gotas pueden resultar extremadamente largos o extremadamente pequeños. En estos casos, el valor del radio se modifica artificialmente para obtener valores más razonables, al recalcularlo usando el contenido de agua líquida y el nuevo tamaño de las gotas.

Para reducir el número de estas situaciones desfavorables, la ecuación (23) puede ser resuelta empleando un método de diferencias finitas *upstream-in-space*, con la consiguiente difusividad numérica asociada (Kato, 1995). El empleo de esquemas numéricos difusivos incrementa el solapamiento de los perfiles verticales de los momentos calculados, resultando en valores más razonables de los valores de radio medio de las gotas. Al mismo tiempo, el radio medio es dependiente de la difusividad del esquema numérico empleado, la cual es determinada por el paso temporal, la resolución vertical y la velocidad terminal, lo cual es una desventaja obvia de dichos esquemas de integración. Este cambio artificial del tamaño de las gotas (y concentración) durante el cálculo de la sedimentación puede afectar dramáticamente el comportamiento de otros procesos microfísicos.

Con el objetivo de mejorar la representación del proceso de sedimentación en esquemas *bulk*, se han realizado varios estudios comparando los resultados de sedimentación obtenidos de esquemas de 1, 2 y 3 momentos con aquellos resultantes de modelos explícitos (Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010; Milbrandt & Yau, 2005a, 2005b; Rodríguez-Genó & Alfonso, 2021b). Incluso se ha incluido el cálculo de la reflectividad (momento de orden 2 en base a la masa) en algunos esquemas de 3 momentos. En (Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010), por ejemplo, se simularon los procesos de sedimentación y clasificación de gotas por tamaños (*size sorting*), en una nube ubicada inicialmente entre 6500 m y 8000 m. El contenido de agua líquida fue 0.5 g m^{-3} , mientras que se consideró una concentración inicial de $3LWC^{-1}$. La formulación del esquema de un momento asume que $N_{i,0} = 8 \cdot 10^6 \text{ m}^{-4}$ y $v = 0$ para la distribución gamma empleada, mientras que la formulación del esquema de dos momentos sólo asume que $v = 0$, mientras que otros parámetros son determinados a partir de los momentos estadísticos calculados. En el esquema de 3 momentos, todos los parámetros de la distribución gamma son determinados por los tres

momentos empleados, por lo que no se requiere ninguna asunción previa para cerrar el sistema de ecuaciones. Los perfiles de los momentos de orden 0, 1 y 2 respecto a la masa, en conjunto con el radio medio de la distribución, fueron calculados resolviendo la ecuación (18) aplicando un esquema de diferencias finitas difusivo similar al esquema *upstream-in-space*.

El análisis de los resultados de (Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010) arroja que los perfiles verticales obtenidos de esquema de 1 momento difiere dramáticamente de la solución de referencia explícita. El esquema de un momento no es capaz de representar el efecto de clasificación por tamaños, ya que los radios medios de las gotas no son realistas, siendo muy pequeños y no muestran dependencia alguna con la altura. A pesar de que los perfiles obtenidos por el esquema de 2 momentos son más realistas, que aquellos del esquema de 1 momento, la clasificación por tamaños es muy marcada en comparación con el esquema explícito. Las simulaciones mostraron que los errores en el esquema de 2 momentos dependen del conjunto de momentos estadísticos considerados, mientras que el empleo de esquemas de 3 momentos reduce considerablemente dichos errores. De acuerdo a estos resultados, se propuso el empleo de esquemas de 3 momentos en los cuales la ecuación de reflectividad es usada, sumada a las ecuaciones para concentración y contenido de agua líquida (Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010; Milbrandt & Yau, 2005b). Estas conclusiones fueron corroboradas en (Loftus & Cotton, 2014).

Además, en (Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010) se propone un enfoque para mejorar el cálculo del proceso de sedimentación en esquemas de 2 momentos, al parametrizar parámetros de la distribución gamma en función de la razón de los dos momentos empleados en la formulación. Los valores del parámetro de forma recomendados para el cálculo de la velocidad terminal difieren de los usados en el resto de las parametrizaciones tipo *bulk*. Nótese que todas las simulaciones fueron realizadas empleando un esquema numérico difusivo.

En el modelo *RAMS* se emplea un método que emula la microfísica explícita, donde la DSD toma la forma de una distribución gamma y es discretizada en secciones antes del cálculo de la sedimentación en cada paso temporal del modelo (Cotton et al., 2003; Feingold et al., 1998). Después de calculada la sedimentación, se emplean los valores actualizados de masa y concentración en cada punto de rejilla para restaurar los valores de los parámetros de la distribución gamma. Este tipo de esquemas son más costosos computacionalmente que los esquemas *bulk* tradicionales, por lo que se recurre al empleo de tablas de búsqueda para calcular

las distancias que caen las gotas pertenecientes a cada sección de la rejilla. Es ampliamente aceptado que este tipo de esquemas producen resultados más cercanos a los modelos de referencia que simplemente calcular la ecuación (18).

Sin embargo, investigaciones desarrolladas por Morrison mostraron que la distribución vertical de los momentos obtenidos de modelos que emulan la microfísica explícita son similares a los de métodos *bulk* (Morrison, 2012). Morrison concluye que es posible mejorar la representación del proceso de sedimentación solamente en esquemas de 2 o 3 momentos, en los que los efectos del cambio de la DSD producto de la sedimentación sean considerados, tales como (Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010; Milbrandt & Yau, 2005b; Wacker & Lüpkes, 2008). Estos efectos deben ser considerados en todas las parametrizaciones donde se incluya el cálculo de la sedimentación, independiente del enfoque o metodología aplicada. Nótese que el cambio en la forma de la DSD producto de la sedimentación está incluido de manera automática en la formulación de los esquemas explícitos.

3. Metodología de investigación

En este capítulo se abordará con detalle la formulación y derivación de la parametrización basada en funciones base empleada para los procesos de condensación, colisión-coalescencia y sedimentación. Además, se explicarán los modelos de microfísica explícita usados, así como la metodología de comparación desarrollada, además de las condiciones iniciales y parámetros empleados en las simulaciones.

3.1. Formulación y metodología de funciones base

La principal suposición de este enfoque parametrizado es que el espectro de gotas puede ser aproximado por una serie de funciones de distribución. Por lo tanto, la distribución que caracteriza la evolución de este espectro estará dada por una combinación lineal de distribuciones como se muestra a continuación:

$$f\langle r \rangle = \sum_{i=1}^I f_i\langle r \rangle \quad (19)$$

Donde $f_i\langle r \rangle$ es un miembro individual del conjunto de distribuciones considerado, e I es el número total de distribuciones que integran el conjunto. Cabe destacar que, en cualquier conjunto de distribuciones considerado, todos sus miembros deben ser del mismo tipo de distribución. Para la parametrización propuesta, según se describe en (Clark, 1976), se emplea la distribución log-normal, definida como:

$$f\langle r \rangle = \frac{N}{\sqrt{2\pi}\sigma r} e^{[-(\ln r - \mu)^2 / (2\sigma^2)]} \quad (20)$$

donde μ y σ^2 representan la media y la varianza de $\ln r$ respectivamente. Considerando que la función de distribución empleada es dependiente del radio de las gotas en lugar de la masa, entonces el momento total de orden p puede ser calculado como (Straka, 2009)

$$N\overline{R^p} = \int_0^{\infty} r^p f(r) dr \quad (21)$$

Podemos obtener la siguiente fórmula analítica para los momentos de la distribución (Clark, 1976)

$$\overline{R^p} = e^{p\mu + \frac{1}{2}p^2\sigma^2} \quad (22)$$

Combinando las ecuaciones (19), (21) y (22) el momento total de orden p de una combinación lineal de distribuciones log-normales es (Clark & Hall, 1983)

$$N\overline{R^p} = \sum_{i=1}^I N_i \overline{R_i^p} = \sum_{i=1}^I N_i e^{p\mu_i + \frac{1}{2}p^2\sigma_i^2} \quad (23)$$

Donde el subíndice i indica cada uno de los miembros individuales del conjunto. Si derivamos (23) respecto al tiempo, obtenemos las tendencias de los momentos totales de una serie de distribuciones log-normales

$$\frac{\partial N\overline{R^p}}{\partial t} = \sum_{i=1}^I N_i \overline{R_i^p} \left(\frac{\partial \ln N_i}{\partial t} + p \frac{\partial \mu_i}{\partial t} + \frac{p^2}{2} \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial t} \right) \quad (24)$$

Las que pueden ser descompuestas en un sistema de ecuaciones de la forma

$$\mathbf{AX} = \mathbf{F} \quad (25)$$

Siendo \mathbf{X} un vector representando las tendencias de los parámetros de las distribuciones

$$\mathbf{X}^T = \left[\frac{\partial \ln N_1}{\partial t}, \frac{\partial \ln N_2}{\partial t}, \dots, \frac{\partial \ln N_I}{\partial t}, \frac{\partial \mu_1}{\partial t}, \frac{\partial \mu_2}{\partial t}, \dots, \frac{\partial \mu_I}{\partial t}, \frac{\partial \sigma_1^2}{\partial t}, \frac{\partial \sigma_2^2}{\partial t}, \dots, \frac{\partial \sigma_I^2}{\partial t} \right] \quad (26)$$

La matriz de coeficientes \mathbf{A} de orden ν ($I = \nu/3$) queda definida como

$$\begin{cases} a_{i,j} = N_j \overline{R_j^{i-1}} / (N\overline{R^{i-1}}) \\ a_{i,j+I} = (i-1) N_j \overline{R_j^{i-1}} / (N\overline{R^{i-1}}) \\ a_{i,j+2I} = \frac{1}{2} (i-1)^2 N_j \overline{R_j^{i-1}} / (N\overline{R^{i-1}}) \end{cases} \quad (27)$$

Siendo $i = 1, 2, \dots, \nu$ y $j = 1, 2, \dots, I$. El vector independiente \mathbf{F} estará compuesto por las tendencias de los momentos totales correspondientes

$$\mathbf{F}^T = \left[\frac{\partial \ln N}{\partial t}, \frac{\partial \ln N\overline{R}}{\partial t}, \dots, \frac{\partial \ln N\overline{R^{\nu-1}}}{\partial t} \right] \quad (28)$$

Tanto \mathbf{A} como \mathbf{F} son normalizados con el objetivo de lograr una mejor estabilidad numérica en la solución del sistema de ecuaciones, y también independizándolos de las unidades de las funciones

de distribución. La actualización de los parámetros de la distribución se efectúa de acuerdo al esquema en diferencias finitas que se presenta a continuación (Clark & Hall, 1983)

$$N_i^{t+1} = N_i^t e^{\frac{\partial \ln N_i^t}{\partial t} \Delta t} \quad (29a)$$

$$\mu_i^{t+1} = \mu_i^t + \frac{\partial \mu_i^t}{\partial t} \Delta t \quad (29b)$$

$$(\sigma^2)_i^{t+1} = (\sigma^2)_i^t + \frac{\partial (\sigma^2)_i^t}{\partial t} \Delta t \quad (29c)$$

3.2. Cálculo de las tendencias de los momentos totales de la distribución

El modelo siguiente incluye la influencia de los procesos de condensación, colisión-coalescencia y sedimentación en la evolución de la DSD, sin considerar los efectos relacionados con la turbulencia. Los procesos microfísicos están descritos en la siguiente ecuación:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t_{cond}} + \frac{\partial f}{\partial t_{coal}} + \frac{\partial f}{\partial t_{sed}} \quad (30)$$

Donde $f(r)$ es la distribución log-normal definida en (20), que describe el número de gotas por centímetro cúbico. El primer término del miembro derecho de (30) representa el cambio en la distribución producto del proceso de condensación de vapor de agua sobre la superficie de las gotas. El segundo término indica los cambios debido a la colisión y coalescencia de gotas de distintos tamaños y el último término representa el proceso de sedimentación gravitacional.

3.2.1. Formulación del proceso de condensación

Los cambios en la distribución según la teoría de condensación están dados por (Clark, 1976)

$$\frac{df}{dt_{cond}} = -\frac{\partial}{\partial r} \left(f \frac{dr}{dt} \right) \quad (31)$$

Donde el crecimiento de una gota individual se calcula de la forma siguiente

$$\frac{dr}{dt} = \frac{kS}{r+l} \quad (32)$$

Siendo S la sobresaturación porcentual, l el coeficiente de condensación formulado por (Chodes et al., 1974) dependiente de un coeficiente de acomodamiento de 0.033; y k representando el

coeficiente de difusividad del vapor de agua, con un valor constante de $0.98 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$ (Clark, 1974). Multiplicando (31) por r^p e integrando en el intervalo $r \in [0, \infty]$, podemos calcular las tendencias del momento total por condensación como

$$\frac{dN\overline{R^p}}{dt} = pkS\chi_1^{p-1} \quad (33)$$

Considerando

$$\chi_1^p = \int_0^{\infty} \frac{r^p f(r) dr}{r+l} \quad (34)$$

Normalizando (33), es posible obtener el vector de tendencias de los momentos totales para el proceso de condensación

$$\frac{d \ln N\overline{R^p}}{dt} = \frac{1}{N\overline{R^p}} \frac{dN\overline{R^p}}{dt} \quad (35)$$

Para reducir la carga computacional que conlleva la resolución numérica de (35), se emplea la siguiente fórmula recursiva

$$\chi_1^p = N\overline{R^{p-1}} - l\chi_1^{p-1} \quad (36)$$

3.2.1.1. Esquema de integración numérica para condensación

Con el objetivo de resolver numéricamente la ecuación (34), se aplica un método de cuadratura basado en el ajuste polinomial de la solución de la integral. Consideremos una integral de la forma

$$\Lambda = \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma f_i(\ln r) d \ln r \quad (37)$$

Y al aplicar el siguiente cambio de variable

$$x_i = \frac{(\ln r - \mu_i)}{\sqrt{2}\sigma_i} \quad (38)$$

Obtenemos una expresión equivalente a la integral (37)

$$\Lambda = \frac{N_i}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(x) e^{-x^2} dx \quad (39)$$

Donde, considerando una distribución lognormal, la función $\gamma(x)$ queda definida como

$$\gamma(x_i) = \frac{e^{p\sqrt{2}\sigma_i x_i + \mu_i}}{e^{\sqrt{2}\sigma_i x_i + \mu_i} + 1} \quad (40)$$

Evaluando (40) en los 9 puntos

$$x_k = (k - 5)\Delta \quad (41)$$

Considerando $\Delta = 0.58$ (Clark, 1976), entonces la solución numérica de (39) es

$$\Lambda = N_i \left[\sum_{k=1}^4 WG_k (\gamma_k + \gamma_{0-k}) + WG_5 \gamma_5 \right] \quad (42)$$

Siendo WG_k los pesos correspondientes a esta cuadratura basada en un ajuste polinomial lagrangiano de orden 8.

3.2.1.2. Modelo explícito de condensación

Para obtener una solución de referencia para la parametrización de condensación, se aplicó un modelo conservativo respecto a la masa (Kovetz & Olund, 1969; Ogura & Takahashi, 1973). Este método fue seleccionado por la precisión en sus resultados y por la sencillez en el proceso de implementación para nuestros propósitos de comparación. Al generar una rejilla similar a la empleada en (Berry, 1967):

$$r_j = r_0 2^{(j-1)/(3j_0)} \quad (43)$$

Es posible someter a un proceso de crecimiento por condensación a cada punto de la malla, empleando la ecuación de crecimiento por difusión de vapor sobre la superficie de las gotas representadas (32). Aplicando diferencias finitas y reorganizando (32) obtenemos

$$r'(j) = r(j) + \left(\frac{kS}{r(j) + l} \right) \Delta t \quad (44)$$

Donde $r'(j)$ representa el radio del punto de rejilla j en el siguiente paso de tiempo. A continuación, calculamos el cambio de la función de distribución en cada nodo de la forma siguiente

$$f'(J) = \sum_{J'=1}^J R(J,J')f(J') \quad (45)$$

Definiendo $R(J,J')$ como

$$R(J,J') = \begin{cases} \frac{r_{J'}^3 - r_{j-1}^3}{r_j^3 - r_{j-1}^3}; & \text{for } r_{j-1}^3 < r_{J'}^3 \leq r_j^3 \\ \frac{r_{j+1}^3 - r_{J'}^3}{r_{j+1}^3 - r_j^3}; & \text{for } r_j^3 < r_{J'}^3 < r_{j+1}^3 \\ 0; & \text{otherwise} \end{cases} \quad (46)$$

3.2.1.3. Condiciones iniciales para la parametrización de condensación

Para las simulaciones realizadas, fue utilizada una combinación lineal de dos distribuciones de tipo log-normal, con el objetivo de alcanzar un nivel de precisión adecuado, imposible de lograr con una sola función de distribución. Tanto el modelo explícito como la parametrización del proceso de condensación explicado en las secciones, emplearon las siguientes condiciones iniciales:

$$N_1 = 190 \text{ cm}^{-3}$$

$$N_2 = 10 \text{ cm}^{-3}$$

$$\bar{r}_1 = 6 \text{ } \mu\text{m}$$

$$\bar{r}_2 = 15 \text{ } \mu\text{m}$$

$$d_1 = d_2 = 0.2$$

Siendo d el coeficiente de dispersión de las funciones de distribución. La sobresaturación se mantuvo en $S=0.3435\%$, mientras que la temperatura y presión se consideraron constantes con valores de $T=283.15 \text{ K}$ y $P=850 \text{ mb}$ respectivamente. Se simularon un total de 500 s con un paso temporal de $\Delta t = 0.25 \text{ s}$.

3.2.2. Tendencias de los momentos totales por colisión-coalescencia

El término relacionado con los efectos del proceso de colisión-coalescencia de gotas sigue la formulación de la KCE (Berry, 1967)

$$\frac{\partial f}{\partial t_{coal}} = \int_0^{m/2} f(m-m')f(m')K(m-m'|m')dm' - \int_0^\infty f(m)f(m')K(m|m')dm' \quad (47)$$

Con $K(m|m')$ representando el kernel de colección hidrodinámico, al cual se le añadió el cálculo de la eficiencia de colisión de las gotas (Hall, 1980), deslindando este modelo parametrizado de otras formulaciones tradicionales como el kernel polinomial de (Long, 1974).

$$K(r|r') = \pi(r+r')^2 E(r,r') |V_T(r) - V_T(r')| \quad (48)$$

Donde $V_T(r)$ representa la velocidad terminal de una gota de radio r y E indica la eficiencia de colección. Para calcular la tendencia momento total de la distribución, reformulamos (47) en función de los momentos estadísticos de las distribuciones de gotas (P. D. Thompson, 1968) y en función del radio

$$\frac{dN\bar{R}^p}{dt} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty F^p(r_1, r_2) K(r_1|r_2) f(r_1) f(r_2) dr_1 dr_2 \quad (49)$$

Donde

$$F^p(r_1, r_2) = (r_1^3 + r_2^3)^{p/3} - r_1^p - r_2^p \quad (50)$$

$$K(r_1|r_2) = \pi(r_1 + r_2)^2 E(r_1, r_2) |V_T(r_1) - V_T(r_2)| \quad (51)$$

Esta formulación de las tendencias totales de los momentos de las distribuciones involucradas debe ser calculadas para actualizar los valores de los parámetros de las DSD, lo que conlleva a la resolución de un número de integrales proporcional a la cantidad de funciones de distribución empleadas. Dichas integrales (49) deben resueltas numéricamente para cada parámetro y paso de tiempo, o ser calculadas previamente y almacenadas en tablas de búsqueda que deben ser consultadas cada vez que sea requerido por la parametrización, lo cual es costoso computacionalmente e inexacto debido a la naturaleza de los métodos de interpolación empleados en las tablas de búsqueda.

Una alternativa viable para la solución de esta limitante es la aplicación de la metodología de Machine Learning (ML) para simular los resultados de las tendencias de los momentos totales de las funciones de distribución. Aplicando este enfoque, se podrían emplear varias redes neuronales (NN por sus siglas en inglés) para replicar el cálculo de las integrales que se encuentran incluidas en la formulación del esquema de funciones base, acelerando la resolución de las integrales sin

sacrificar la precisión de los resultados. En la siguiente sección se explicará detalladamente la metodología de ML aplicada al cálculo de las tendencias totales de los momentos expresada en (49).

3.2.2.1. Machine Learning y Redes Neuronales

Recientemente, se han aplicado varias metodologías de ML a la solución de problemas relacionados con la modelación numérica del tiempo, tanto en simulaciones climáticas como a menor escala. Las técnicas de ML pueden ser definidas como un conjunto de métodos analíticos que permiten a un sistema descubrir por sí mismo patrones, tendencias y relaciones en los datos suministrados. En particular, las redes neuronales (NN) constituyen una herramienta poderosa para resolver problemas complejos de ajustes no lineales, y pueden ser empleadas para ajustar formas funcionales de datos complejos, tales como la solución de la KCE. Recientemente, las NN han sido usadas redes neuronales multicapa (DNN por sus siglas en inglés), también conocidas como redes neuronales profundas, para realizar el posprocesamiento de los pronósticos numéricos con el objetivo de aumentar su precisión (Sanders, 2018), mientras que el ámbito de parametrización de fenómenos meteorológicos a escala inferior a la resolución de la malla, dichas DNN han sido empleadas con éxito en modelos climáticos (Brenowitz & Bretherton, 2018; Rasp et al., 2018). En microfísica de nubes, estas redes se han utilizado para parametrizar el proceso de autoconversión (Alfonso & Zamora, 2021; Sobhani et al., 2018) con buenos resultados, ya que la parametrización basada en redes neuronales simularon los valores de referencia con mayor precisión que los enfoques tipo bulk. Además, se han desarrollado parametrizaciones parciales del proceso de colisión-coalescencia, por ejemplo (Seifert & Rasp, 2020), donde se desarrolló una parametrización basada en ML que incluye los procesos de autoconversión y acreción, describiendo el DSD a través de una distribución gamma y estableciendo un estudio comparativo que reveló las ventajas y limitaciones del empleo de la metodología de ML en microfísica de nubes.

3.2.2.2. Arquitectura de las Redes Neuronales

Los problemas a solucionar con ML se pueden clasificar en tres categorías: aprendizaje supervisado, no supervisado y reforzado. En el aprendizaje supervisado, existe un conocimiento previo de los valores de salida a simular (\vec{y}_k) para un conjunto determinado de valores de entrada (\vec{x}_k), siendo $k=1,2,\dots,n$, donde n representa el número de valores de entrada. El objetivo es encontrar la función $f(\vec{x})$ de tal manera que al emplear nuevos datos \vec{x}_{new} , f aproxime de manera

correcta la solución. El conjunto de datos $\{\vec{x}_k, \vec{y}_k\} k = 1, 2, \dots, n$ se denomina Conjunto de Datos de Entrenamiento (CDE). Para evaluar la habilidad de la NN para reproducir de manera correcta los datos de salida, el CDE se divide en datos de entrenamiento y datos de prueba.

La base de las DNN son las neuronas artificiales. Una neurona toma los datos de entrada, los procesa y los guía a una función de activación $\sigma(z)$, que devuelve el valor de salida activado (Fig. 2). La Figura 3 muestra una representación gráfica de una DNN. El valor de activación de una neurona i en la capa l se representa como a_i^l y se calcula de la siguiente forma

$$a_i^l = \sigma(z_i^l) \quad (51)$$

$$z_i^l = b_i^l + \sum_{j=1}^{m_{l-1}} W_{i,j}^l a_j^{l-1} \quad (52)$$

En (52), b_i^l es la desviación (bias), $W_{i,j}^l$ es el valor de ponderación, m_{l-1} es el número de neuronas en la capa $l-1$, y $\sigma(z)$ es la función de activación. Por lo tanto, una NN puede ser interpretada como una función que depende de los valores de entrada \vec{x} , los pesos \vec{W} y las desviaciones \vec{b} , o sea, $\vec{y}(\vec{x}, \vec{W}, \vec{b})$, y su entrenamiento consiste en la optimización de los pesos y las desviaciones con el objetivo de minimizar la función de error (también llamada “loss function”) para un conjunto de datos determinado. Usualmente, la función de error es el error cuadrático medio. Por ello, se necesita un algoritmo que minimice

$$C(\vec{W}, \vec{b}) = \frac{1}{2n} \sum_k \|\vec{y}(\vec{x}_k, \vec{W}, \vec{b}) - \vec{y}_k\|^2 \quad (53)$$

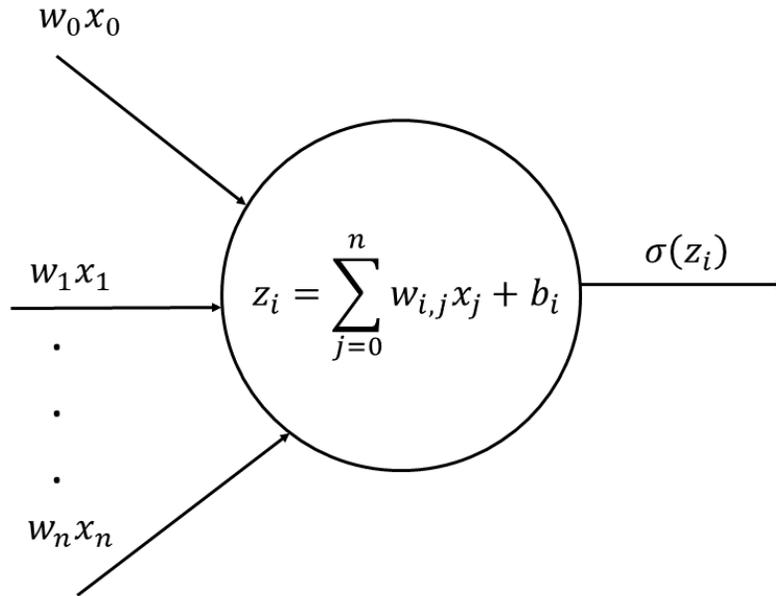


Figura 2: Representación esquemática de una neurona artificial.

El algoritmo propuesto para minimizar la función de error (53) es la regularización bayesiana, la cual actualiza los pesos y las desviaciones de acuerdo a la optimización de Levenberg-Marquardt. Se emplea un mecanismo de propagación hacia atrás para calcular el jacobiano de la eficiencia respecto a los pesos y desviaciones (Dan Foresee & Hagan, 1997; MacKay, 1992). La DNN fue desarrollada usando MATLAB, y está compuesta por una capa de entrada (input), tres capas intermedias (hidden layers) con 20 neuronas cada una y una capa de salida (output) con una sola neurona (Fig. 3).

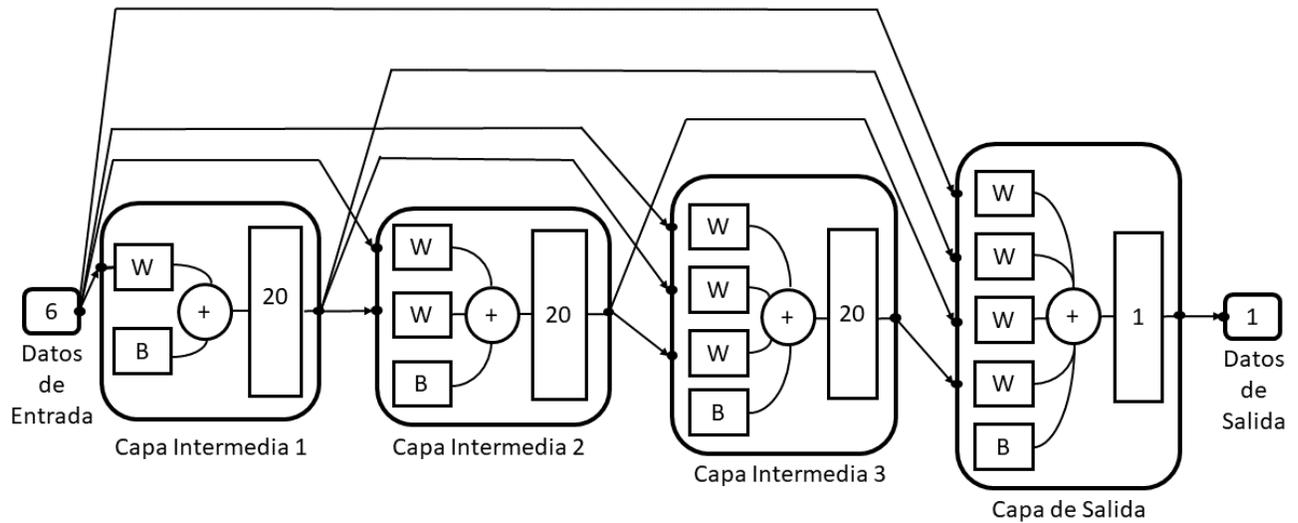


Figura 3: Representación esquemática de la arquitectura de la Red Neuronal diseñada. La Red Neuronal recibe 6 datos de entrada, los procesa a través de las capas intermedias, y devuelve un solo valor de tendencia del momento del orden correspondiente.

3.2.2.3. Creación de las bases de datos de entrenamiento y validación

El procedimiento para entrenar la NN consiste en alimentar la red con 6 datos de entrada (input) correspondientes a los parámetros de las funciones de distribución lognormales empleadas en la formulación de la parametrización correspondientes a las tendencias de los momentos totales de orden p como objetivo de entrenamiento. La relación entre los parámetros de entrada y las tendencias de los momentos totales es obtenida al resolver numéricamente (49). El algoritmo de entrenamiento procesa estos datos con el objetivo de establecer relaciones estadísticas entre los datos de entrada y objetivo. Este proceso se repite hasta que se cubran todos los datos de entrenamiento. La NN entrenada resultante debería ser capaz de estimar las tendencias totales de los momentos, dado un conjunto de parámetros de entrada que se encuentre incluido dentro del rango de los datos de entrenamiento. La Fig. 4 muestra una representación esquemática de la NN entrenada, incluyendo los datos de entrada y salida.

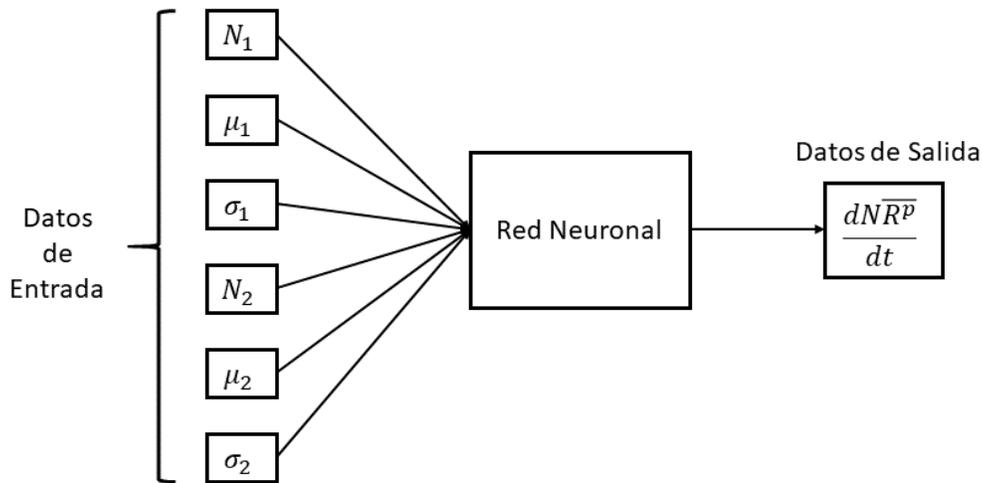


Figura 4: Datos de entrada y salida de la red neuronal entrenada. Los datos de entrada son los 6 parámetros de las distribuciones incluidas en la parametrización necesarios para calcular la ecuación (45) ($N_1, \mu_1, \sigma_1, N_2, \mu_2$ y σ_2), mientras que los datos de salida son las tendencias de los momentos totales de orden p ($\frac{dNR^p}{dt}$).

Para generar las bases de datos de entrenamiento y validación se emplearon 100000 espectros de gotas derivados de las variables de entrada, incluyendo un amplio rango de parámetros ($N_1, \mu_1, \sigma_1, N_2, \mu_2$ y σ_2), los cuales se muestran en la Fig. 5. Dichos parámetros se utilizan en el cálculo de las tendencias de los momentos de (49) y para entrenar la DNN. Se entrenaron 5 redes neuronales, correspondientes a cada uno de los órdenes de los momentos calculados (momentos de orden 0 a 5). Se emplearon las mismas variables de entrada (parámetros) para entrenar todas las redes, variando solamente el orden de la tendencia del momento a simular. Las variables físicas relacionadas con los parámetros de entrada se representan en la Fig. 6, para una mejor comprensión de las nubes y espectros de gotas utilizados en el entrenamiento de las redes. Las bases de datos de entrenamiento y validación fueron generadas aleatoriamente siguiendo una distribución uniforme. La media y desviación estándar de los parámetros de entrada se muestran en la Tabla 1, así como los rangos definidos para cada variable.

Tabla 1: Descripción estadística de las variables de entrada incluidas en las bases de datos de entrenamiento y validación.

Variable	Valor medio	Desviación Estándar	Rango
Concentración (N)	250.80	144.13	[1.00; 500.00]

Parámetro μ	-7.00	0.58	[-8.00; -6.00]
Parámetro σ	0.20	0.06	[0.10; 0.30]

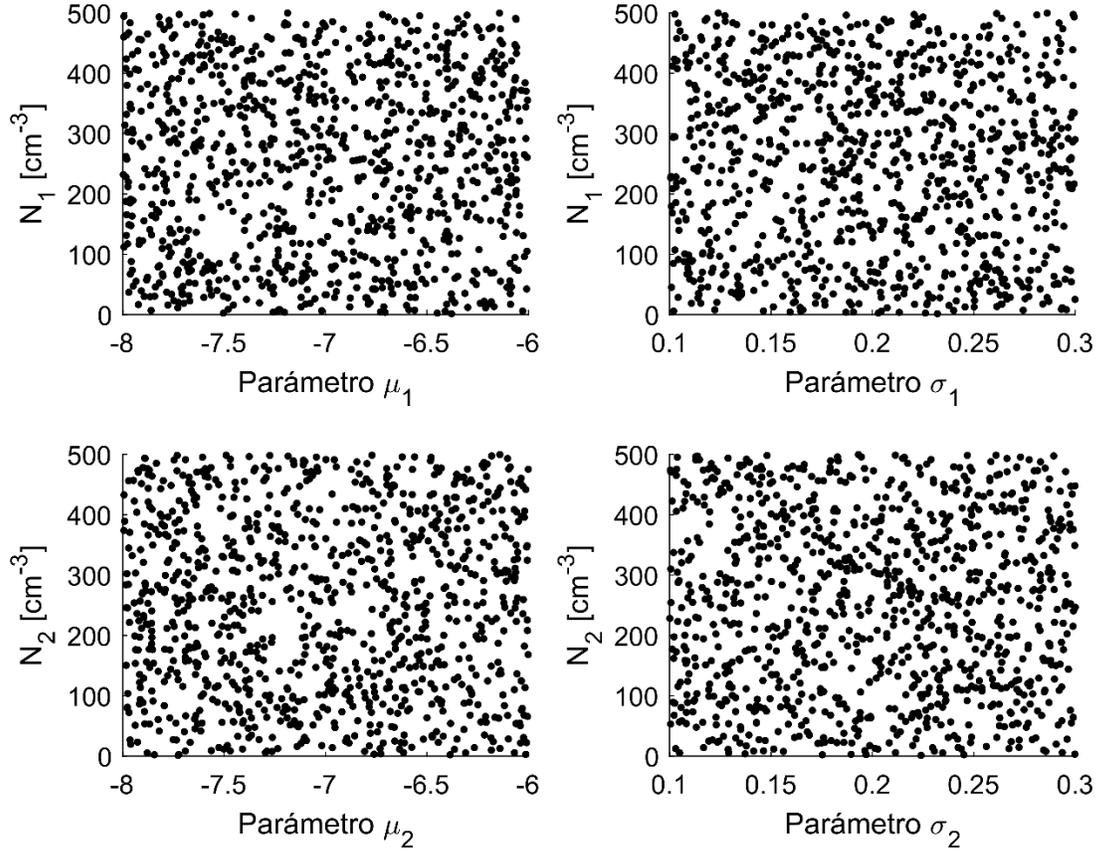


Figura 5: Gráfico de dispersión de los parámetros de entrada de las distribuciones lognormales empleadas para calcular las tendencias de los momentos totales. Los parámetros correspondientes a la función f_1 se muestran en la primera fila, mientras que los correspondientes a f_2 se muestran en la segunda fila. Se muestran 1 de cada 100 del número total de datos.

La Fig. 6 muestra que, dentro del rango de los datos de entrenamiento (concentración entre 1 cm^{-3} y 500 cm^{-3}), encontramos valores de contenido de agua líquida (LWC) entre $10^{-10} \text{ g cm}^{-3}$ y $10^{-4} \text{ g cm}^{-3}$, con la mayoría de los datos concentrados entre los rangos de $10^{-8} \text{ g cm}^{-3}$ y $10^{-5} \text{ g cm}^{-3}$. Dichos valores cubren un rango suficientemente amplio de LWC para representar de manera adecuada la estructura y contenido de las nubes calientes en el marco de la presente parametrización de colisión-coalescencia (Rodríguez-Genó & Alfonso, 2021a).

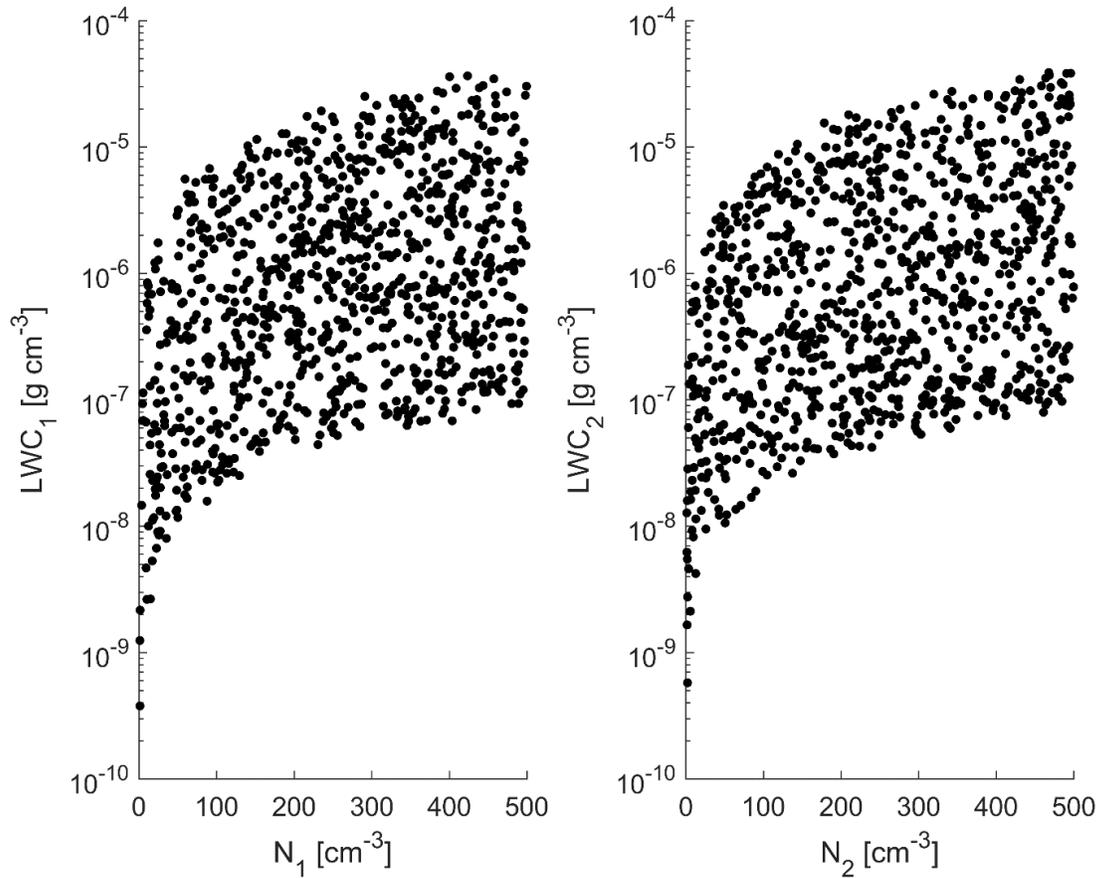


Figura 6: Gráfico de dispersión del contenido de agua líquida (LWC) obtenido de los parámetros de entrada de f_1 (izquierda) y f_2 (derecha) vs concentración (N). Los contenidos de agua líquida fueron obtenidos del momento estadístico de orden 3 usando los parámetros mostrados en la Fig. 5, empleando la ecuación (22). Se muestran 1 de cada 100 del número de datos totales.

3.2.2.4. Entrenamiento y validación de las redes neuronales

Del total de datos disponibles, el 80% fue empleado en entrenar la DNN, mientras que el 20% restante es usado para la validación de las redes entrenadas. Las tendencias totales de los momentos fueron calculadas a partir de la ecuación (49), empleando un esquema de integración trapezoidal sobre una rejilla logarítmica equidistante definida entre los rangos de $1 \mu m \leq r \leq 10^4 \mu m$. Los datos resultantes de la solución de esta ecuación se denominan datos objetivo (target) (Rodríguez-Genó & Alfonso, 2021a). Los valores medios y desviaciones estándar de las tendencias de los momentos totales se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2: Descripción estadística de las tendencias de los momentos totales por colisión-coalescencia. Los datos fueron calculados a partir de la ecuación (45), con los parámetros de entrada de las distribuciones como datos de entrada.

Orden del Momento Total	Valor Medio	Desviación Estándar
M0	-0.0021	0.0014
M1	-0.0015	0.0011
M2	-0.0009	0.0006
M3	0.0000	0.0000
M4	0.0011	0.0007
M5	0.0024	0.0016

Tanto los datos de entrada como objetivo fueron normalizados al sustraer la media y dividir entre la desviación estándar, como se muestra a continuación

$$x_{norm} = \frac{x - \bar{x}}{\sigma} \quad (54)$$

Dichos valores requieren normalización para facilitar el cálculo del algoritmo de optimización. Todos los nodos en cada capa de la red usan el MSE como función de error. El procedimiento de entrenamiento de las redes consiste en enviar un grupo de datos a través de la red neuronal, calcular el error incurrido en el pronóstico y los gradientes de la función de error a través de las capas que integran la red, para actualizar los pesos y las desviaciones. Este algoritmo se repite sobre todos los datos de entrenamiento hasta que el índice de rendimiento empleado (en este caso el MSE) sea lo suficientemente pequeño o se complete un número de ciclos predeterminado (cada ciclo también se conoce como “epoch”). En este caso, se estableció un número máximo de 1000 ciclos de entrenamiento sobre los datos, y un valor de MSE mínimo de 10^{-7} para la función de gradiente.

Se entrenaron 5 redes, una para orden de los momentos estadísticos empleados en la formulación de la parametrización (de orden 0 a 5). Para entrenar la red se empleó una variante del proceso conocida como entrenamiento en cascada (cascade-forward neural network training). La principal diferencia con los procesos de entrenamiento usuales consiste en que este método incluye

conexiones entre la capa de entrada y cada una de las capas internas de la red, así como que cada capa se conecta a cada una de las anteriores. Al igual que los procedimientos de entrenamiento tradicionales, una red entrenada con el método de cascada es capaz de aprender cualquier relación entre los datos de entrada y objetivo, dado el suficiente número de neuronas en cada capa. Las tendencias para los momentos totales de orden 3 no fueron calculadas, debido a que el proceso de colisión-coalescencia es conservativo respecto a la masa, y por lo tanto la solución de la ecuación (49) es 0 para el momento del orden correspondiente (Rodríguez-Genó & Alfonso, 2021a).

La Fig. 7 muestra los registros de entrenamiento de las redes para las tendencias de los momentos totales obtenidas de la ecuación (49). La velocidad de convergencia es similar en todos los casos, ya que todas las redes convergieron al alcanzar el máximo número de ciclos (iteraciones) de entrenamiento. Esto ocurre porque los valores de la función de gradiente nunca alcanzaron el umbral definido para la función de error, por lo que el algoritmo de entrenamiento continuó refinando los datos hasta que se completaron 1000 ciclos de entrenamiento. A pesar de ello, se logró un rendimiento adecuado en el entrenamiento de las redes, con un MSE del orden de 10^{-4} para todos los órdenes de las tendencias de los momentos totales involucrados, como se muestra en la Tabla 3.

Tabla 3: Mejor rendimiento obtenido en el proceso de entrenamiento de las redes neuronales. Los datos mostrados corresponden a las tendencias obtenidas de las NN entrenadas, con datos de entrada y salida tomados de la base de datos de validación. La medida de rendimiento empleada es el Error Cuadrático Medio (MSE).

Orden del Momento Total	Mejor Rendimiento (MSE)
M0	2.59e-04
M1	3.49e-04
M2	2.68e-04
M4	1.80e-04
M5	2.05e-04

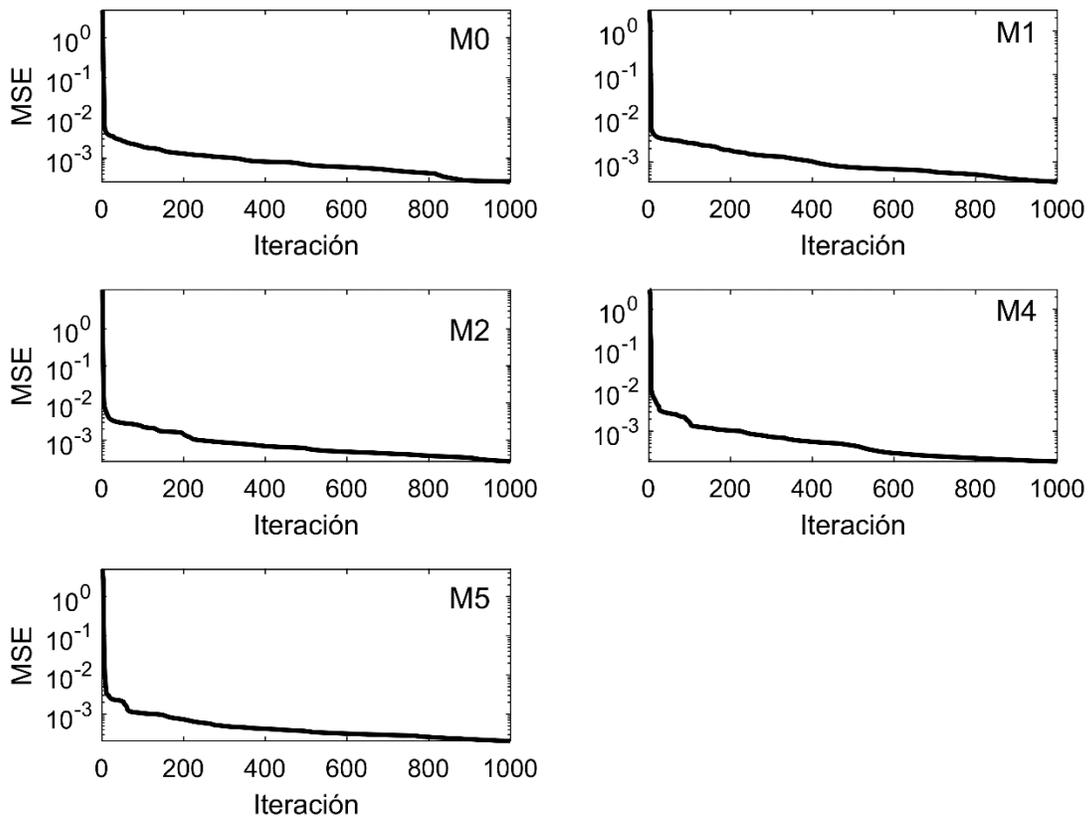


Figura 7: Registros de rendimiento de las tendencias de los momentos totales de orden 0 a 5. Los datos mostrados corresponden a las tendencias obtenidas de las NN entrenadas, con datos de entrada y salida tomados de la base de datos de validación. La medida de rendimiento empleada es el Error Cuadrático Medio (MSE). El registro de rendimiento del momento de orden 3 no se muestra porque el proceso de colisión-coalescencia es conservativo respecto a la masa.

La Fig. 8 muestra los gráficos de regresión de las redes neuronales entrenadas. La comparación se estableció entre los valores de salida de las NN entrenadas y aquellos que integran la base de datos de validación obtenida de la solución de la ecuación (49). En la figura se aprecian pequeñas desviaciones respecto a la solución, sin embargo, existe un buen ajuste a los datos de validación en todos los momentos calculados, presentando un coeficiente de correlación entre 0.9998 y 0.9999 en todos los casos analizados. Los rangos de los ejes de las gráficas varían porque los datos graficados no se encuentran normalizados, por lo que existen diferentes rangos para diferentes tendencias de los momentos.

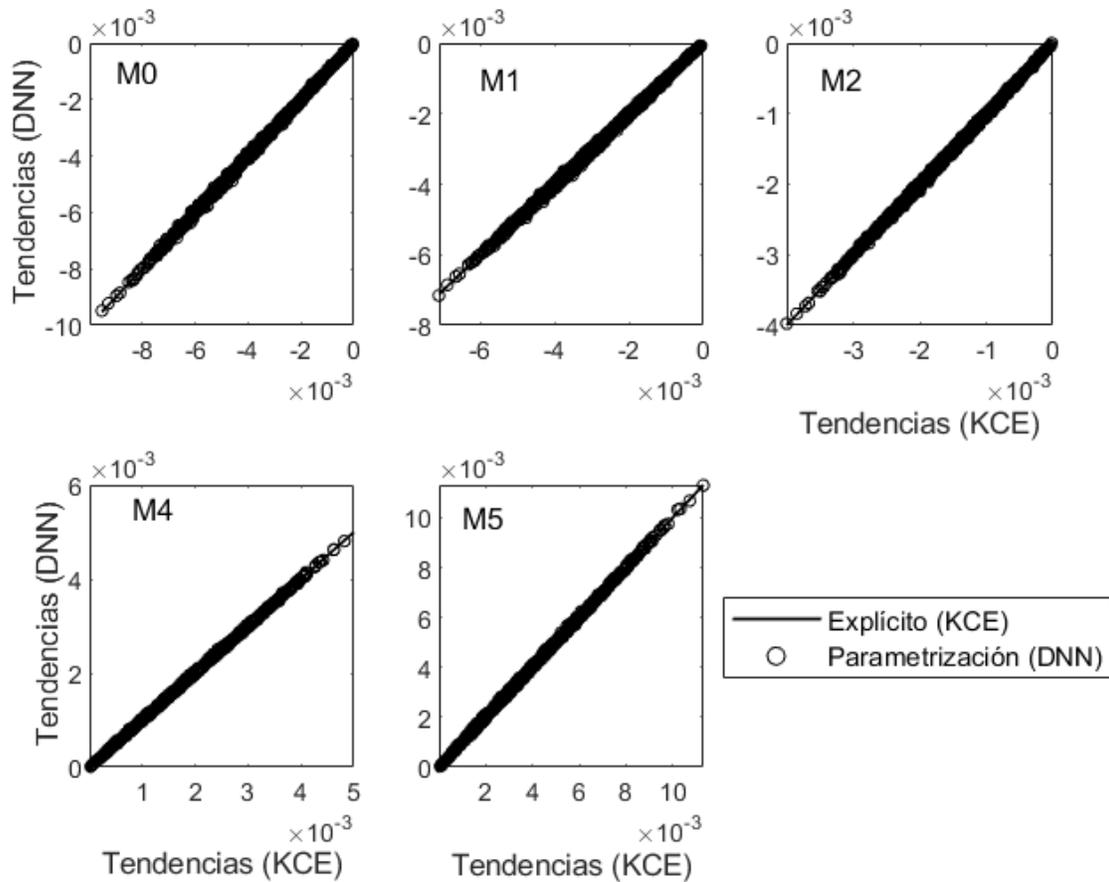


Figura 8: Gráficos de regresión de las 5 redes neuronales entrenadas. Los datos mostrados corresponden a las tendencias obtenidas de las NN entrenadas, con datos de entrada y salida tomados de la base da datos de validación. El gráfico de regresión del momento de orden 3 no se muestra porque el proceso de colisión-coalescencia es conservativo respecto a la masa.

Se realizaron un número de experimentos sin normalizar los datos de entrenamiento, sin embargo, los MSE obtenidos fueron de al menos un orden de magnitud mayor, por lo que no se muestran en el presente trabajo producto de la baja precisión en los resultados obtenidos.

3.2.2.5. Modelo explícito de colisión-coalescencia

Para calcular la evolución del espectro de gotas de manera más precisa, se empleó un método de flujo para la solución numérica de la KCE (Bott, 1998). Este esquema es conservativo respecto a la masa y muy eficiente computacionalmente. Se basa en la integración numérica de la KCE que, reescrita de una manera más conveniente, queda expresada como se muestra a continuación:

$$\frac{dn(x, t)}{dt} = \int_{x_0}^{x_1} n(x_c, t)K(x_c, x')n(x', t)dx' - \int_{x_0}^{\infty} n(x, t)K(x, x')n(x', t)dx' \quad (55)$$

donde $n(x, t)$ es la distribución de gotas al tiempo t y $K(x_c, x')$ representa el kernel de colección que describe la tasa a la que una gota de masa $x_c = x - x'$ es atrapada por una gota de masa x' , formando una gota de masa x . En la ecuación (55), x_0 representa la masa de la gota más pequeña involucrada en el proceso de colección, y $x_1 = x/2$ (Bott, 1998). Con el objetivo de simplificar los cálculos, se empleó la función de densidad de masa $g(y, t)$

$$g(y, t)dy = xn(x, t)dx \quad (56)$$

$$n(x, t) = \frac{1}{3x^2}g(y, t) \quad (57)$$

Donde $y = \ln r$ y r representan el radio de una gota de masa x . Sustituyendo (56) en (55), es posible obtener la KCE en base a la función de densidad de masa (Bott, 1998)

$$\frac{dg(y, t)}{dt} = \int_{y_0}^{y_1} \frac{x^2}{x_c^2 x'} g(y_c, t)K(y_c, y')g(y', t)dy' - \int_{y_0}^{\infty} g(y, t) \frac{K(y, y')}{x'} g(y', t)dy' \quad (58)$$

La primera integral del miembro derecho de (58) representa la ganancia de gotas de masa x debido a la colisión-coalescencia de dos gotas de menor tamaño, mientras que la segunda integral representa la pérdida de gotas de masa x , al ser capturadas por gotas de mayor tamaño. Para la solución numérica de (58) se emplea una rejilla logarítmica equidistante construida de la siguiente forma:

$$x_{k+1} = \alpha x_k, \quad k = 1, 2, \dots, m \quad (59)$$

estructurando la rejilla por las y de manera equidistante, $\Delta y_k = \Delta y = \ln \alpha / 3$. Nótese que m es el total de puntos de la malla.

3.2.2.6. Condiciones iniciales para la parametrización de colisión-coalescencia

Para comprobar la efectividad de la parametrización de colisión-coalescencia desarrollada, se simularon un total de $t = 900$ s (15 minutos) para ambos modelos. Los parámetros de las distribuciones iniciales se muestran en la Tabla 4, siguiendo la configuración de (Clark, 1976).

Tabla 4: Parámetros iniciales de las funciones de distribución del modelo parametrizado. Cada distribución es caracterizada por un parámetro de concentración (N), un valor esperado (μ) y la desviación estándar (σ).

Parámetro	f_1	f_2
N	190 cm^{-3}	10 cm^{-3}
μ	-7.1505	-6.5219
σ	0.1980	0.1980

El espectro inicial del modelo explícito es calculado a partir de estos parámetros, con el objetivo de asegurar las mismas condiciones iniciales al momento de la comparación. Para su integración, se define una rejilla logarítmica equidistante, cubriendo un dominio entre $0.25 \mu\text{m} \leq r \leq 2.6 \times 10^4 \mu\text{m}$ de radio. Se usaron las ecuaciones (56) y (57) para compatibilizar las salidas de ambos modelos, mientras que las cantidades totales del modelo de referencia son integradas directamente de DSD calculado.

3.2.3. Tendencias de los momentos totales por sedimentación

Los cambios sobre la distribución producto de la sedimentación gravitacional de las gotas fue tomado de (Milbrandt & Yau, 2005a). En dicho artículo se calculan las tendencias del momento total de la distribución en función de la velocidad terminal ponderada por el momento total, empleando una distribución gamma. Esta forma de parametrizar el proceso de sedimentación fue reformulado para su uso con distribuciones log-normales (Huang, 2014), quedando los cambios en el momento p -ésimo de la distribución de la siguiente forma:

$$\frac{\partial N\overline{R^p}}{\partial t} = \frac{\partial(N\overline{R^p} \overline{V}_p)}{\partial z} \quad (59)$$

Con \overline{V}_p representando la velocidad terminal ponderada por los momentos, definida como (Straka, 2009)

$$\overline{V}_p = \frac{\int_0^\infty r^p V_T(r) f(r) dr}{\int_0^\infty r^p f(r) dr} \quad (60)$$

Con el objetivo de resolver de forma analítica la ecuación (60), se asume una forma de ley de potencias para velocidad terminal siguiendo (Ziemer & Wacker, 2014)

$$V_T(r) = \alpha D^\beta$$

$$\alpha = 1300 \text{ cm}^{1-\beta} \text{ s}^{-1} \quad (61)$$

$$\beta = 0.5$$

Usando la ecuación (61), es posible obtener una solución analítica de (60) en la forma (Ziemer et al., 2014)

$$\bar{V}_p(z, t) = \alpha \frac{\overline{NR^{p+\beta}}}{\overline{NR^p}} \quad (62)$$

Las tendencias de los momentos son calculadas aplicando un esquema de diferencias finitas centradas en una rejilla vertical previamente definida, como se muestra en la siguiente ecuación

$$\frac{\partial \overline{NR^p}}{\partial t} = \frac{(\overline{NR^p} \bar{V}_p)_{i+1}^t - (\overline{NR^p} \bar{V}_p)_{i-1}^t}{2\Delta z} \quad (63)$$

Para el proceso de sedimentación gravitacional, se realizó una modificación al esquema original de la parametrización (Clark, 1976), en la cual no se calculan la evolución de los parámetros de las funciones de distribución, sino los parámetros actualizados según la relación (Ziemer & Wacker, 2014)

$$N = \overline{NR^0} \quad (64)$$

$$\mu = \ln\left(\frac{\overline{NR^2}}{\overline{NR^1}}\right) - \frac{3}{2}\ln(X); \left(\mu = \frac{1}{3}\left(\ln\left(\frac{\overline{NR^6}}{\overline{NR^3}}\right) - \frac{3}{2}\ln(X)\right)\right) \quad (65)$$

$$\sigma = \sqrt{\ln(X)}; \left(\sigma = \frac{1}{3}\sqrt{\ln(X)}\right) \quad (66)$$

Considerando $X = \overline{NR^0} \overline{NR^2} / (\overline{NR^1})^2$; $(X = \overline{NR^0} \overline{NR^6} / (\overline{NR^3})^2)$; $X > 1$ (Huang, 2014; Ziemer & Wacker, 2014). Esta relación directa entre los parámetros de las distribuciones log-normales y sus momentos permitirá un cálculo preciso de la evolución de cada distribución por el proceso de sedimentación gravitacional de gotas. Para el cálculo discretizado se genera una rejilla vertical de 10km de extensión, con un $dz=50m$, lo cual es resultado de la aplicación del criterio de Courant-Friedrichs-Levy para garantizar la estabilidad numérica del modelo. En dicha rejilla se calculan de

manera independiente la evolución de los momentos según la ecuación (63) con el objetivo de comparar las tendencias obtenidas por un método de diferencias finitas y las obtenidas a partir de la evolución de los parámetros de la distribución de la parametrización.

3.2.3.1. Modelo explícito de sedimentación

Con el objetivo de determinar de manera precisa la evolución del espectro de gotas por sedimentación, se calcula la siguiente ecuación explícita de sedimentación:

$$\frac{\partial f(z, t, r)}{\partial t} + V_T(r) \frac{\partial (f(z, t, r))}{\partial z} = 0 \quad (67)$$

Con la velocidad terminal calculada según (61) y $f(r)$ definida en la ecuación (20). Esta forma de la ecuación espectral con sedimentación como el único proceso a resolver puede ser calculada basados en una rejilla similar a (59). En nuestro caso particular, se definió una rejilla de 400 puntos en el rango de $1 \mu m \leq r \leq 10^4 \mu m$. Los momentos estadísticos que servirán de referencia a los resultados de la parametrización son calculados a través de la integración numérica correspondiente de la ecuación (67).

3.2.3.2. Condiciones iniciales de la parametrización de sedimentación

El dominio de simulación será tratado como una columna vertical de 10 km de altura, dividida en puntos de rejilla con una resolución vertical de 50 m. Se simulará un total de 900 s con un paso temporal de 0.1 s, asegurando así la estabilidad numérica de la solución. El esquema de discretización empleado es el método de forward-in-time y upstream-in-space, y se aplica tanto a la parametrización de sedimentación como a la solución de referencia. Inicialmente, se considera una nube ubicada entre $8 km \leq z \leq 9.75 km$. Esta nube es compuesta por un espectro inicial de gotas en cada punto de rejilla. Las condiciones iniciales variarán de acuerdo a los tres experimentos que se explican a continuación.

- Condiciones Iniciales con una distribución (IC-1): Se considera solo una función de distribución, con las condiciones iniciales siguientes: $N_1 = 200 cm^{-3}$, $R_1 = 89 \mu m$.
- Condiciones Iniciales con dos distribuciones (IC-2): Se considera una combinación lineal de dos funciones de distribución con las condiciones iniciales siguientes: $N_1 = 120 cm^{-3}$; $R_1 = 60 \mu m$ y $N_2 = 80 cm^{-3}$; $R_2 = 131 \mu m$.

- Condiciones Iniciales con dos distribuciones (IC-3): Se considera una combinación lineal de tres funciones de distribución, con las condiciones iniciales siguientes: $N_1 = 120\text{cm}^{-3}$; $R_1 = 60\ \mu\text{m}$; $N_2 = 50\text{cm}^{-3}$; $R_2 = 120\ \mu\text{m}$ y $N_3 = 30\ \text{cm}^{-3}$; $R_3 = 150\ \mu\text{m}$.

Se emplea un coeficiente de dispersión de $cod = 0.2$ para todas las funciones de distribución. Los espectros iniciales correspondientes a cada experimento se ilustran en la Fig. 9. Se calcula un máximo de tres funciones de distribución ya que es posible alcanzar una descripción más detallada del espectro de gotas con un mayor número de funciones de densidad que lo describan. Se considera que este número de distribuciones en la combinación lineal es un compromiso adecuado entre la precisión de los resultados y el costo computacional del modelo parametrizado.

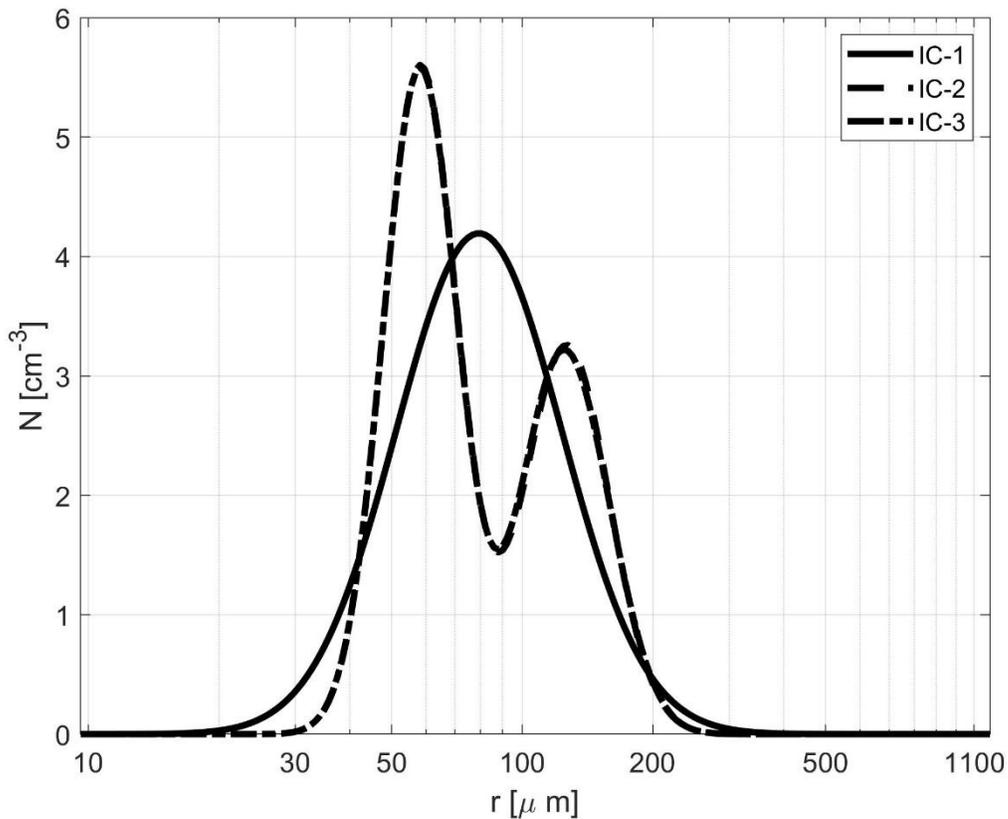


Figura 9: Espectro inicial de gotas para las tres condiciones iniciales.

3.2.3.3. Diseño de experimentos de la parametrización de sedimentación

Con el objetivo de determinar la precisión del método en el cálculo de la solución explícita, se empleará una configuración basada en el conjunto de momentos de orden 0, 1 y 2. En estos casos,

se establece la comparación entre los resultados de la parametrización y la solución de referencia utilizando las mismas condiciones iniciales (el mismo número de distribuciones), a la que se le llamará la solución explícita equivalente.

Se lleva a cabo un segundo conjunto de experimentos con condiciones iniciales idénticas, pero usando un conjunto de momentos adicional en la formulación de la parametrización (momentos de orden 0, 3 y 6). Dicho experimento tiene como objetivo determinar la habilidad de la parametrización al reproducir un espectro complejo de gotas (el cual consta de una combinación lineal de tres distribuciones y será denominado la solución explícita compleja). Además, se realizará un análisis de los errores en el cálculo de la evolución de los momentos, para determinar cuál conjunto de momentos reproduce mejor la solución compleja del espectro.

3.3. Número de condición del sistema de ecuaciones

En el campo de análisis numérico, el número de condición de una función mide cuánto puede cambiar el resultado de la misma debido a un pequeño cambio en el argumento. Es usado para medir cuán sensible es una función a posibles cambios o errores en los valores de entrada, y cuánto error se transmite a los resultados.

El número de condición es una aplicación de la derivación, y es formalmente definido como el valor del cambio relativo asintótico en el peor de los casos en los resultados para un cambio relativo en la entrada. El número de condición se aplica usualmente en problemas de álgebra lineal, caso en el cual las derivadas se encuentran muy bien definidas, pero los errores pueden provenir de diferentes fuentes, y por lo tanto pueden ser calculados a partir de la geometría de la matriz.

Un problema con un número de condición bajo, se dice que está bien condicionado, mientras que un problema con un número de condición alto se conoce como mal condicionado. En lenguaje común, un problema mal condicionado es aquél que, para un pequeño cambio en los valores de entrada (las variables independientes), ocurre un gran cambio en los resultados (variable dependiente). Esto significa que la solución correcta de un problema mal condicionado es difícil de encontrar. Sin embargo, el número de condición no brinda un valor exacto de la inexactitud del problema. Generalmente solo brinda un estimado máximo, cuyo valor depende de la norma seleccionada.

Por ejemplo, el número de condición asociado con la ecuación lineal $Ax = b$ da un límite sobre cuán inexacta será la solución x después de la aproximación. Considere que esto es antes de que se tengan en cuenta los efectos del error de redondeo; el condicionamiento es una propiedad de la matriz, no el algoritmo o la precisión de punto flotante de la computadora utilizada para resolver el sistema correspondiente. En particular, uno debería pensar en el número de condición como (muy aproximadamente) la tasa a la que la solución x cambiará con respecto a un cambio en b . Por lo tanto, si el número de condición es grande, incluso un error pequeño en el vector independiente b puede causar un error grande en x . Por otro lado, si el número de condición es pequeño, entonces el error en x no será mucho mayor que el error en b . El número de condición se define con mayor precisión como la relación máxima entre el error relativo en x y el error relativo en b .

Sea e el error en b . Suponiendo que A es una matriz no singular, el error en la solución $A^{-1}b$ es $A^{-1}e$. La razón del error relativo en la solución al error relativo en b es

$$\frac{\|A^{-1}e\|/\|e\|}{\|A^{-1}b\|/\|b\|} = \frac{\|A^{-1}e\|}{\|e\|} \frac{\|b\|}{\|A^{-1}b\|}$$

El valor máximo (para b y e distinto de cero) se ve entonces como el producto de las dos normas del operador de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \max_{e,b \neq 0} \left\{ \frac{\|A^{-1}e\|}{\|e\|} \frac{\|b\|}{\|A^{-1}b\|} \right\} &= \max_{e \neq 0} \left\{ \frac{\|A^{-1}e\|}{\|e\|} \right\} \max_{b \neq 0} \left\{ \frac{\|A^{-1}b\|}{\|b\|} \right\} \\ &= \max_{e \neq 0} \left\{ \frac{\|A^{-1}e\|}{\|e\|} \right\} \max_{x \neq 0} \left\{ \frac{\|A^{-1}x\|}{\|x\|} \right\} \\ &= \|A^{-1}\| \|A\| \end{aligned}$$

Esta misma definición es empleada para cualquier norma consistente, es decir, una que satisfaga la siguiente condición:

$$\kappa(A) = \|A^{-1}\| \|A\| \geq \|A^{-1}A\| = 1$$

Cuando el número de condición es exactamente uno (lo que solo puede suceder si A es un múltiplo escalar de una isometría lineal), entonces un algoritmo de solución puede encontrar (en principio, es decir, si el algoritmo no introduce errores propios) una aproximación de la solución cuya precisión no es peor que la de los datos. Sin embargo, esto no significa que el algoritmo convergerá rápidamente a esta solución, solo que no divergirá arbitrariamente debido a la inexactitud en los

datos de origen, siempre que el error hacia adelante introducido por el algoritmo no diverja también porque de acumulación de errores de redondeo intermedios. El número de condición también puede ser infinito, pero esto implica que el problema está mal planteado (no posee una solución única y bien definida para cada elección de datos; es decir, la matriz no es invertible) y ningún algoritmo puede esperar encontrar una solución confiable. La definición del número de condición depende de la elección de la norma, como se ilustra a continuación.

Si $\|\cdot\|$ es la norma definida en el espacio de secuencia sumable al cuadrado L^2 (que coincide con la distancia habitual en un espacio euclidiano estándar y generalmente se denota como $\|\cdot\|_2$), entonces

$$\kappa(A) = \frac{\sigma_{max}(A)}{\sigma_{min}(A)}$$

Dónde $\sigma_{max}(A)$ y $\sigma_{min}(A)$ son los valores singulares máximo y mínimo de A respectivamente. Por eso:

- Si A es normal, entonces

$$\kappa(A) = \frac{\lambda_{max}(A)}{\lambda_{min}(A)}$$

Dónde $\lambda_{max}(A)$ y $\lambda_{min}(A)$ son los valores propios máximo y mínimo de A respectivamente.

- Si A es una matriz unitaria, entonces $\kappa(A) = 1$.

El número de condición con respecto a L^2 surge con tanta frecuencia en el álgebra lineal numérica que se le da un nombre, el número de condición de una matriz, el cual será usado como base en el análisis de la estabilidad numérica del sistema de ecuaciones de la parametrización desarrollada.

Si el número de condición no es mucho mayor que 1, la matriz está bien acondicionada, lo que significa que su inversa se puede calcular con buena precisión. Si el número de condición es muy grande, se dice que la matriz está mal acondicionada. Prácticamente, tal matriz es casi singular, y el cálculo de su inversa, o la solución de un sistema lineal de ecuaciones, es propenso a grandes errores numéricos. Una matriz que no es invertible tiene un número de condición igual a infinito.

4. Resultados y discusión

En el capítulo anterior se describió la metodología de funciones base (Clark, 1976) aplicada al desarrollo de parametrizaciones para los procesos de condensación, colisión-coalescencia y sedimentación gravitacional de gotas. En este capítulo se muestran los resultados de las simulaciones realizadas con dichas parametrizaciones, se compararán sus resultados con aquellos obtenidos de los modelos explícitos correspondientes y se analizarán los mismos. La evaluación de los esquemas parametrizados tendrá como objetivo comprobar cuán eficientes y acertados son los resultados de las simulaciones realizadas para calcular la evolución de las distribuciones de gotas en el tiempo de acuerdo a los diferentes procesos microfísicos analizados que tienen lugar en el interior de las nubes calientes. Todos los procesos son simulados de manera cero-dimensional (exceptuando la sedimentación) para ver su evolución temporal. En las siguientes secciones se mostrarán los resultados de las parametrizaciones de cada uno de los procesos mencionados, así como su comparación con los modelos de referencia.

4.1. Resultados de la parametrización de condensación

Los resultados obtenidos de la parametrización del crecimiento del espectro de gotas por condensación muestran que los cálculos son conservativos respecto a la concentración numérica de gotas, como se muestra en la Fig. 10. Debido al enfoque matemático de esta parametrización, en la que se calcula la evolución de los parámetros de la distribución en lugar de la evolución de los momentos o magnitudes representativas de magnitudes físicas tales como el contenido de agua líquida o reflectividad, trae como consecuencia que los valores individuales de dichas cantidades no poseen ningún significado físico. Es la combinación lineal de dichos componentes lo que representan los procesos físicos que se procura simular, y por lo tanto deben ser interpretados de esa manera, en particular cuando tratamos con magnitudes no conservativas tales como la concentración numérica. Esta interpretación de la parametrización será aplicada a todos los resultados presentados en el presente trabajo.

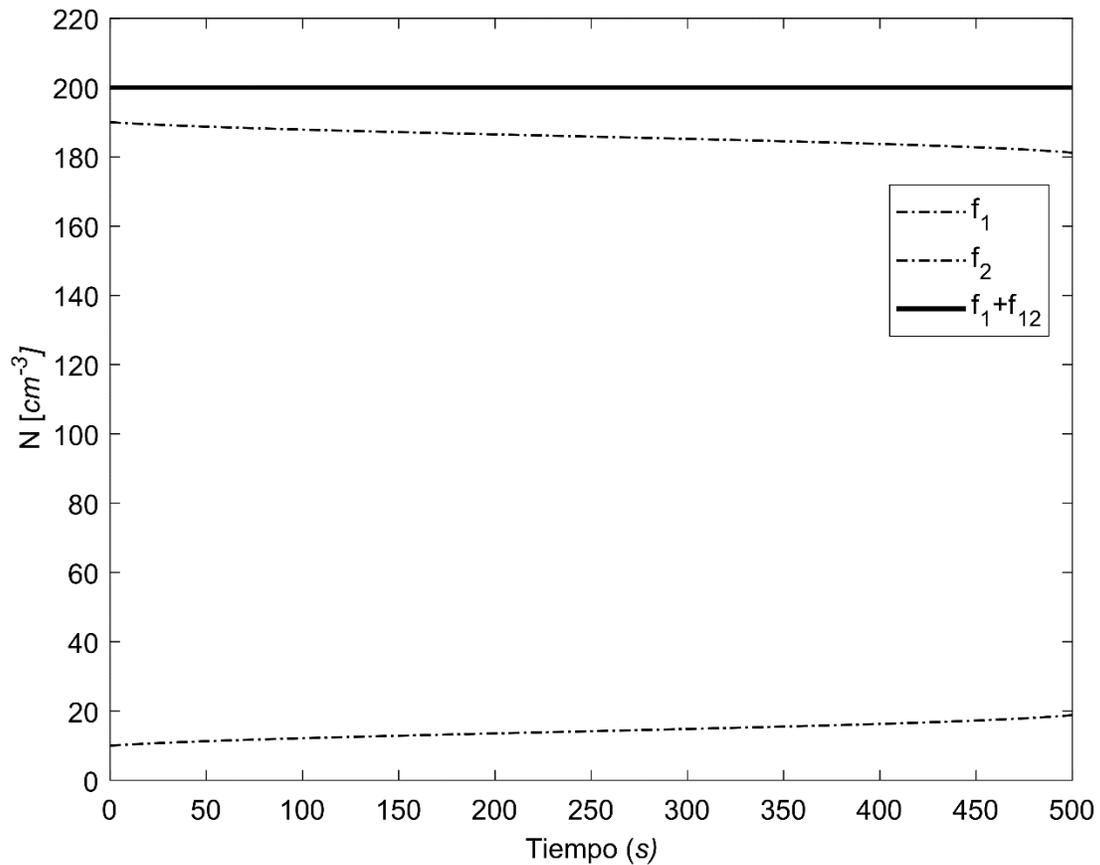


Figura 10: Evolución de la concentración producto de la parametrización del proceso de condensación.

En el caso de la concentración, podemos apreciar el cambio de los miembros individuales de la serie, pero la concentración total permanece constante. En cuanto a la masa, la Fig. 11 muestra un incremento de la misma, lo que es consistente con el proceso simulado. Con magnitudes conservativas como la masa, la interpretación de los resultados se hace mucho más clara, apreciándose un incremento más acelerado de las gotas más pequeñas, lo que evidencia su proporcionalidad inversa con el radio de las gotas.

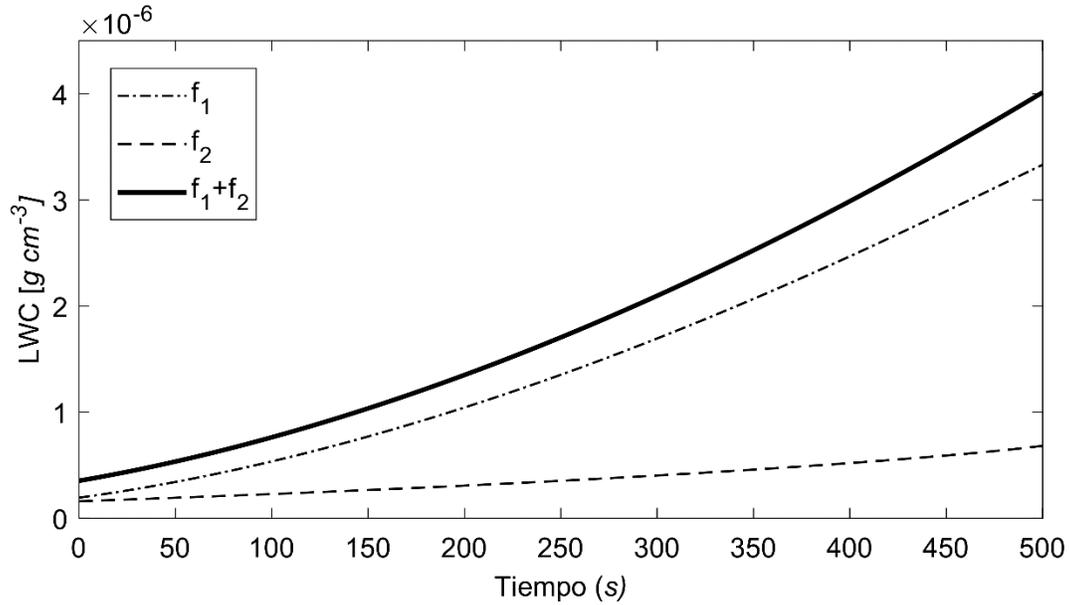


Figura 11: Contenido de agua líquida producto de la parametrización de condensación.

La evolución de la función de densidad de masa se muestra en la Fig. 12. La parametrización muestra un incremento en la masa correspondiente con lo graficado en la Fig. 11, y desarrolla un espectro con poca dispersión, ilustrando el incremento en el radio medio de las gotas y la disminución en la variedad de tamaños de las mismas, mientras que el modelo explícito muestra un espectro con un radio medio igual al de la parametrización, con una dispersión similar. Es conocido que el modelo explícito empleado (Kovetz & Olund, 1969; Ogura & Takahashi, 1973) introduce una dispersión artificial del espectro, pero esta característica no limita en manera alguna la veracidad de los resultados obtenidos, ya que al emplearse una combinación lineal de dos distribuciones log-normales, el carácter dispersivo del modelo explícito facilita el cálculo de la evolución de las gotas debido al proceso de condensación en las zonas donde ambas distribuciones se solapan, mitigando las posibles distorsiones e inestabilidades introducidas por el algoritmo numérico para el cálculo de las integrales correspondientes (Khain et al., 2015).

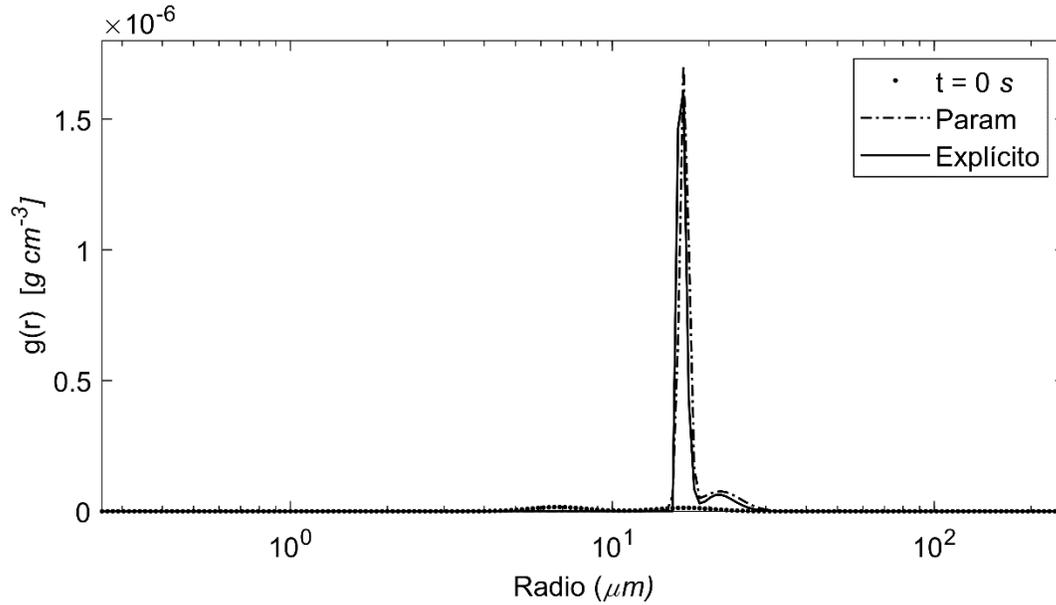


Figura 12: Función de densidad de masa producto de la parametrización de condensación.

4.2. Resultados de la parametrización de colisión-coalescencia

El resultado directo de la parametrización de colisión-coalescencia son los parámetros actualizados en cada paso temporal para cada una de las funciones de distribución incluidas ($N_1, \mu_1, \sigma_1, N_2, \mu_2$ y σ_2). Las cantidades totales (*bulk*) tales como radio medio o contenido de agua líquida son calculadas a partir de dichos parámetros. Además, al integrar las funciones de distribución correspondientes sobre una rejilla de masa o radio, es posible obtener el espectro total de gotas en cada paso de tiempo empleando los parámetros de las distribuciones.

4.2.1. Comparación de los espectros de gotas de la parametrización de colisión-coalescencia

La Fig. 13 muestra una comparación entre la función de densidad de masa derivada de la parametrización de colisión-coalescencia y la solución de referencia del modelo explícito, para tres instantes de tiempo seleccionados (300 s, 600 s y 900 s).

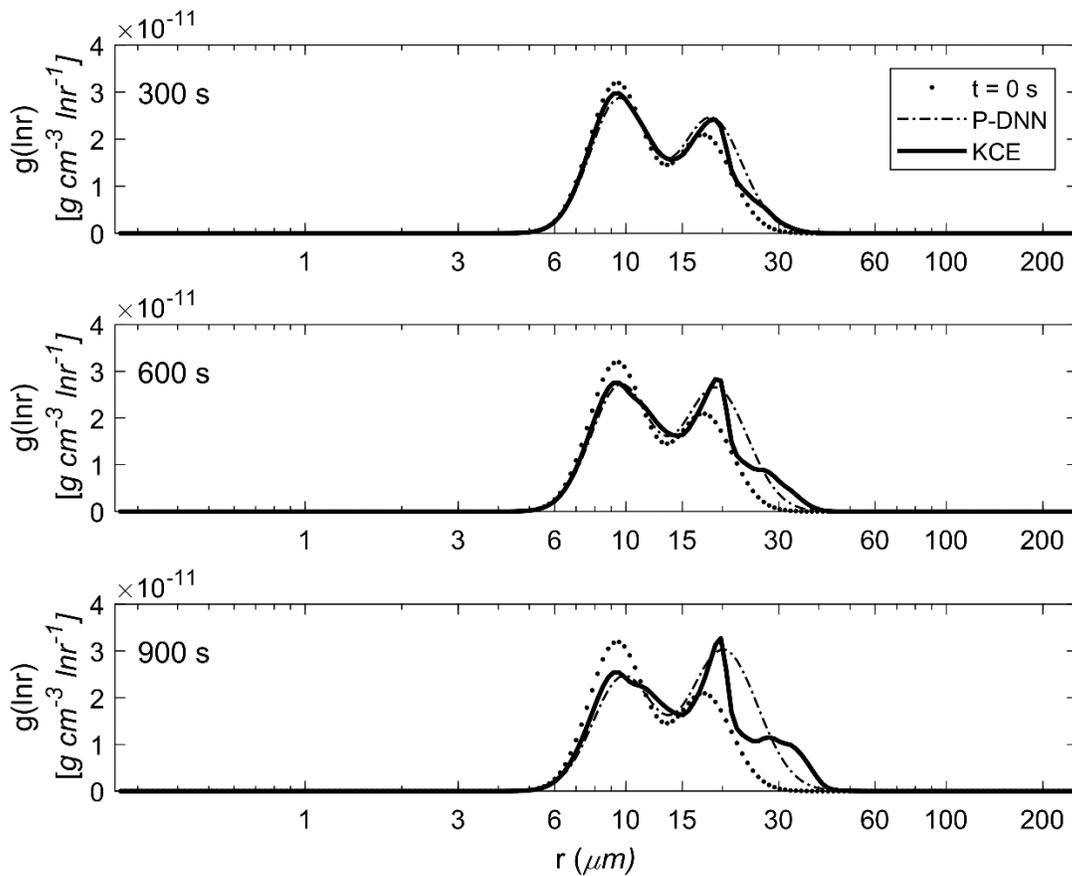


Figura 13: Espectro de densidad de masa del modelo parametrizado (P-DNN) y el modelo explícito (KCE). Los tiempos representados son 300 s (primera fila), 600 s (segunda fila) y 900 s (tercera fila). La ecuación (56) fue empleada para transformar el espectro de concentración de gotas del modelo parametrizado a un espectro de densidad de masa.

Transcurridos 300 s (primera fila de la Fig. 13) se aprecia un desarrollo lento del espectro de gotas, con una clara transferencia de masa de la distribución f_1 a f_2 . El espectro obtenido de la parametrización muestra un buen ajuste con la solución de referencia, mostrando una ligera sobrestimación de la masa máxima en el segundo modo del espectro. El radio medio de las distribuciones es bien representado por la parametrización. Transcurridos 600 s y 900 s (segunda y tercera fila de la Fig. 13, respectivamente), se observa el desarrollo de un tercer modo en el espectro del modelo explícito, el cual es reproducido por la parametrización como un segundo modo más amplio que simula de manera correcta el radio medio y la distribución de la masa. El modelo parametrizado es incapaz de reproducir la generación de un tercer modo en el espectro, debido a que cuenta con sólo dos funciones de distribución en su formulación. Esta limitante puede ser superada al introducir una tercera función de distribución a la combinación lineal, lo cual es

posible en el marco de la metodología de funciones base. Sin embargo, esto conllevaría el cálculo de las tendencias de tres momentos adicionales a los ya establecidos, con el consiguiente entrenamiento de las redes neuronales correspondientes, y el incremento en el costo computacional de la parametrización. El primero modo del espectro es simulado de manera adecuada en los dos últimos tiempos mencionados. En la figura se aprecia un incremento en el radio medio producto del proceso de colisión-coalescencia de las gotas. Este resultado es el esperado y está en concordancia con investigaciones previas en la materia, y con la teoría y observaciones del proceso microfísico en estudio.

La Fig. 14 muestra una comparación entre el espectro de concentración numérica de gotas derivado de la parametrización y aquél obtenido del modelo explícito, para tres tiempos determinados. Se observa un ajuste bastante bueno entre ambas soluciones, con los resultados de la parametrización subestimando ligeramente la solución de referencia. Como el proceso de colisión-coalescencia disminuye la concentración numérica de gotas, no se aprecia un incremento en el número de gotas en el segundo modo de las distribuciones. Sin embargo, se observa un incremento en el radio medio, que es consistente con la transferencia de masa representada en la Fig. 13, y el consiguiente crecimiento del tamaño de las gotas de mayor radio, al capturar a las más pequeñas.

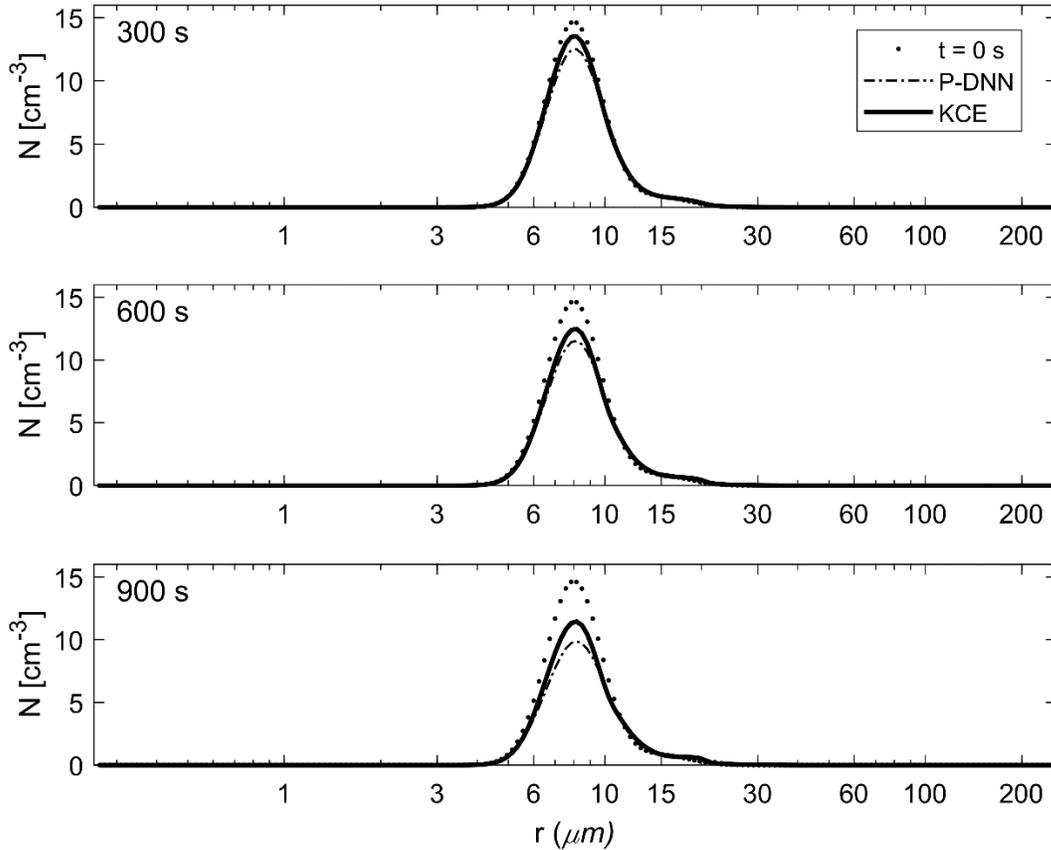


Figura 14: Espectro de concentración numérica de gotas del modelo parametrizado (P-DNN) y el modelo explícito (KCE). Los tiempos representados son 300 s (primera fila), 600 s (segunda fila) y 900 s (tercera fila). La ecuación (57) fue empleada para transformar el espectro de densidad de masa del modelo explícito a un espectro de concentración numérica de gotas.

4.2.2. Comparación de las cantidades totales de la parametrización de colisión-coalescencia

La Fig. 15 muestra una comparación entre dos cantidades *bulk* principales (concentración total de gotas y radio medio) obtenidas del modelo parametrizado y el modelo explícito. Los valores de concentración y radio medio de la solución de referencia fueron obtenidos al integrar el espectro de concentración numérica de gotas para el momento estadístico del orden correspondiente (orden 0 para la concentración y orden 1 para el radio medio). Como era de esperar, La concentración numérica de gotas disminuye en el tiempo, debido a la coalescencia de gotas, variando desde un valor inicial de 200 *gotas/cm*³ hasta 160 *gotas/cm*³ en el modelo explícito. La concentración predicha por el modelo parametrizado subestima la solución de referencia en la mayoría de la simulación, con diferencias que alcanzan 10 *gotas/cm*³ transcurridos 900 s. Los

resultados del radio medio muestran un comportamiento similar, con un crecimiento en el tamaño de las gotas consistente con la disminución en la concentración numérica. Sin embargo, las diferencias son pequeñas, siendo $0.5 \mu m$ el error máximo incurrido. Además, de manera general los resultados muestran un ajuste adecuado a la solución de referencia, lo que permitiría la inclusión de esta parametrización en un modelo numérico del tiempo. Esta concordancia entre los valores de concentración numérica de gotas y radio medio de las mismas apunta a la conservación de la masa en el modelo parametrizado, una condición obligatoria en el proceso de colisión-coalescencia.

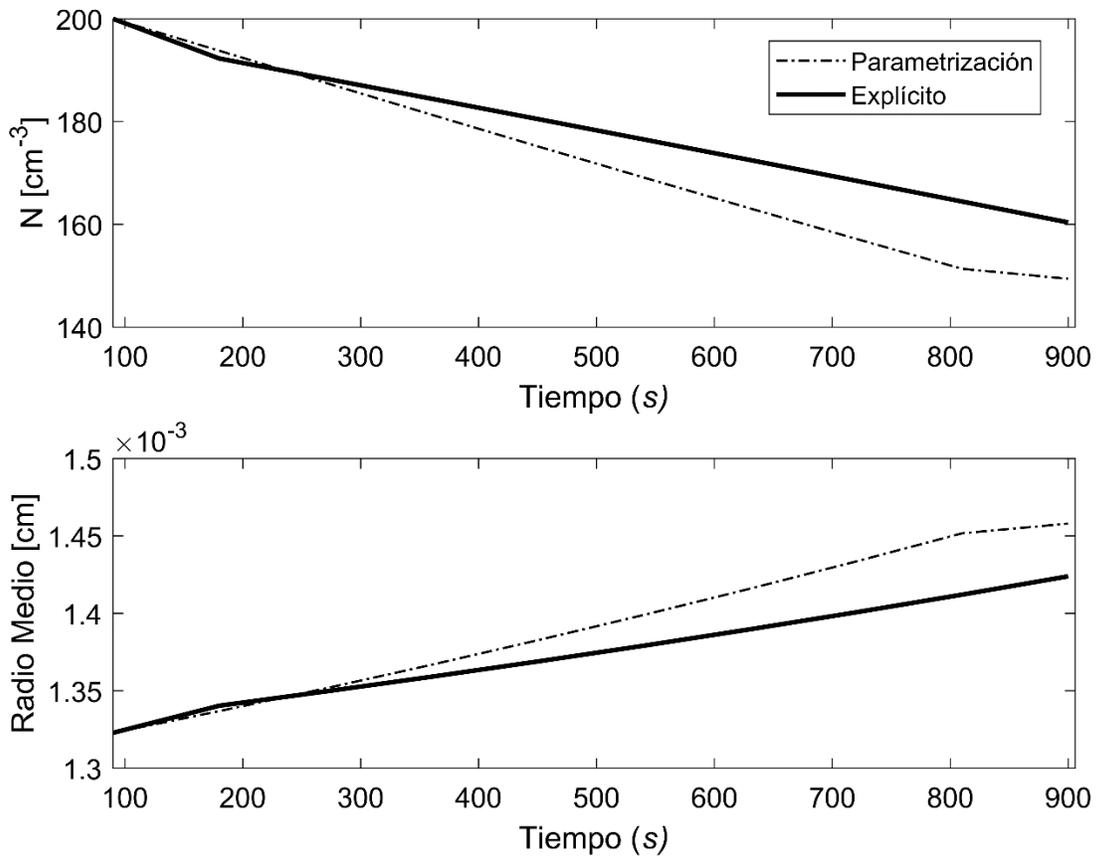


Figura 15: Comparación de los valores de concentración numérica de gotas (primera fila) y radio medio (segunda fila) con la solución de referencia. Los valores de concentración y radio medio del modelo explícito fueron obtenidos al integrar el espectro de concentración numérica para el momento estadístico del orden correspondiente (0 para concentración y 1 para radio medio). Los datos se muestran cada 60 s.

La Fig. 16 muestra la evolución de la concentración numérica de gotas y el contenido de agua líquida (masa) para las funciones de distribución individuales (f_1 y f_2), así como los valores totales de dichas variables (calculados como $f_1 + f_2$). Respecto a la concentración, se aprecia una disminución en los valores de f_1 , mientras que se incrementa ligeramente en f_2 producto de la colisión-coalescencia de gotas de todos los tamaños. Sin embargo, se observa una disminución en el valor total de concentración (el único parámetro con sentido físico en la formulación de la parametrización), lo cual concuerda con la teoría y observaciones realizadas de proceso microfísico parametrizado.

El contenido de agua líquida (calculado a partir del momento de orden 3 en el modelo parametrizado) se muestra para verificar que la masa se conserva bajo el marco de esta parametrización. Efectivamente, el valor de masa total se mantiene invariable durante toda la simulación, con un valor de $6.1739 \times 10^{-7} \text{ g cm}^{-3}$, con una transferencia de masa proporcional entre ambas funciones de distribución. Este comportamiento es consistente con las tendencias nulas del momento de orden 3 al momento de entrenar las redes neuronales para el cálculo de las tendencias de los momentos totales de las distribuciones, explicadas en el capítulo anterior.

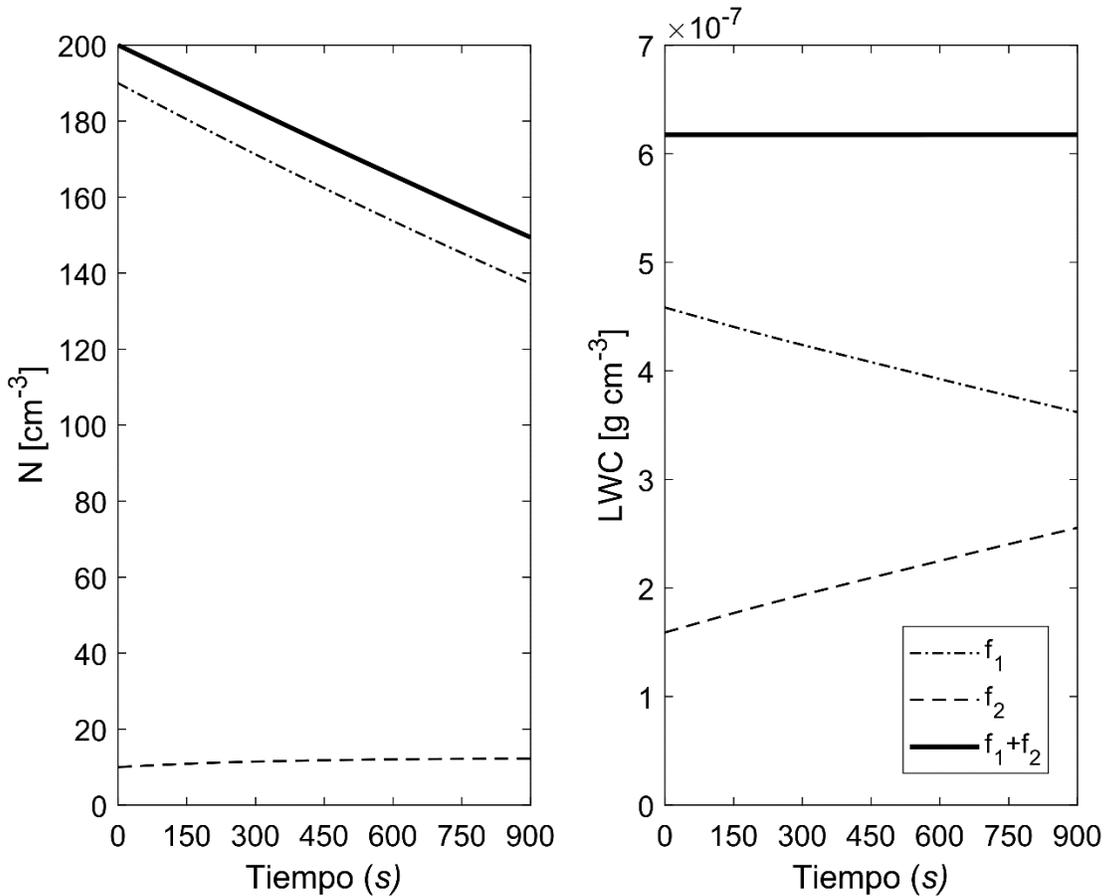


Figura 16: Evolución de la concentración numérica de gotas (izquierda) y el contenido de agua líquida (derecha) de las distribuciones individuales que conforman el modelo parametrizado.

4.2.3. Errores en el cálculo de los momentos totales por colisión-coalescencia

Adicionalmente al análisis de los resultados tradicionales de un modelo parametrizado (mostrados en las secciones anteriores), se realizó un análisis de los errores incurridos en el cálculo de los momentos totales simulados, con el objetivo de profundizar determinar la precisión de las redes neuronales entrenadas. Es importante determinar de manera adecuada la precisión en el cálculo de los momentos, ya que de ellos dependen los valores de los parámetros actualizados y de las cantidades totales calculadas en la parametrización, tales como concentración de gotas y contenido de agua líquida. El error porcentual medio en el cálculo de cada momento total se encuentra resumido en la Tabla 5. El error porcentual es calculado relativo a los momentos integrados del modelo explícito. Los datos mostrados fueron calculados al obtener el valor medio de los errores incurridos durante toda la simulación. Los momentos del modelo explícito fueron calculados al

integrar el espectro de concentración numérica de gotas empleando la ecuación (21), mientras que los momentos totales del modelo parametrizado fueron calculados empleando los parámetros actualizados para alimentar la ecuación (23). La Tabla 5 refleja que se alcanzó un nivel de precisión razonable, con un error máximo de 3.3479 %, correspondiente al momento de orden 0. Sin embargo, los datos muestran que los momentos totales de orden 0 a 2 son normalmente subestimados, mientras que los de orden 4 y 5 se sobrestiman ligeramente. Estos resultados explican la subestimación en los valores de concentración total mostrados en la Fig. 15.

Tabla 5: Errores porcentuales medios en el cálculo de los momentos totales. El error porcentual es tomado en referencia al modelo explícito. Los datos mostrados fueron calculados al calcular el valor medio de los errores porcentuales incurridos durante toda la simulación.

Orden del Momento Total	Error Porcentual Medio
M0	-3.3479
M1	-2.6437
M2	-1.4969
M3	0
M4	1.1249
M5	0.7205

La Fig. 17 muestra la evolución temporal del error porcentual de los momentos totales de las distribuciones durante toda la simulación. Los errores porcentuales son calculados tomando el modelo explícito como referencia. El error porcentual del momento de orden 3 es cero durante toda la simulación, debido a que el proceso de colisión-coalescencia no afecta la masa. En la figura se aprecia que los momentos totales de orden 0 a 2 sobrestiman ligeramente la solución de referencia en los primeros 300 s de simulación, mientras que los subestiman durante el resto de la simulación, alcanzando un valor absoluto máximo de 8 %. Los momentos totales de orden 4 y 5 muestran un comportamiento inverso, subestimando la solución de referencia en el primer tercio de la simulación, y sobrestimándola durante el resto del experimento, con un error máximo absoluto de 4 %. De manera general, estos resultados indican una precisión adecuada del modelo parametrizado, ya que nunca se rebasa el umbral de 10 % de error. Sin embargo, se recomienda la

realización de un análisis más profundo sobre este tema, con el objetivo de mejorar la precisión del modelo parametrizado.

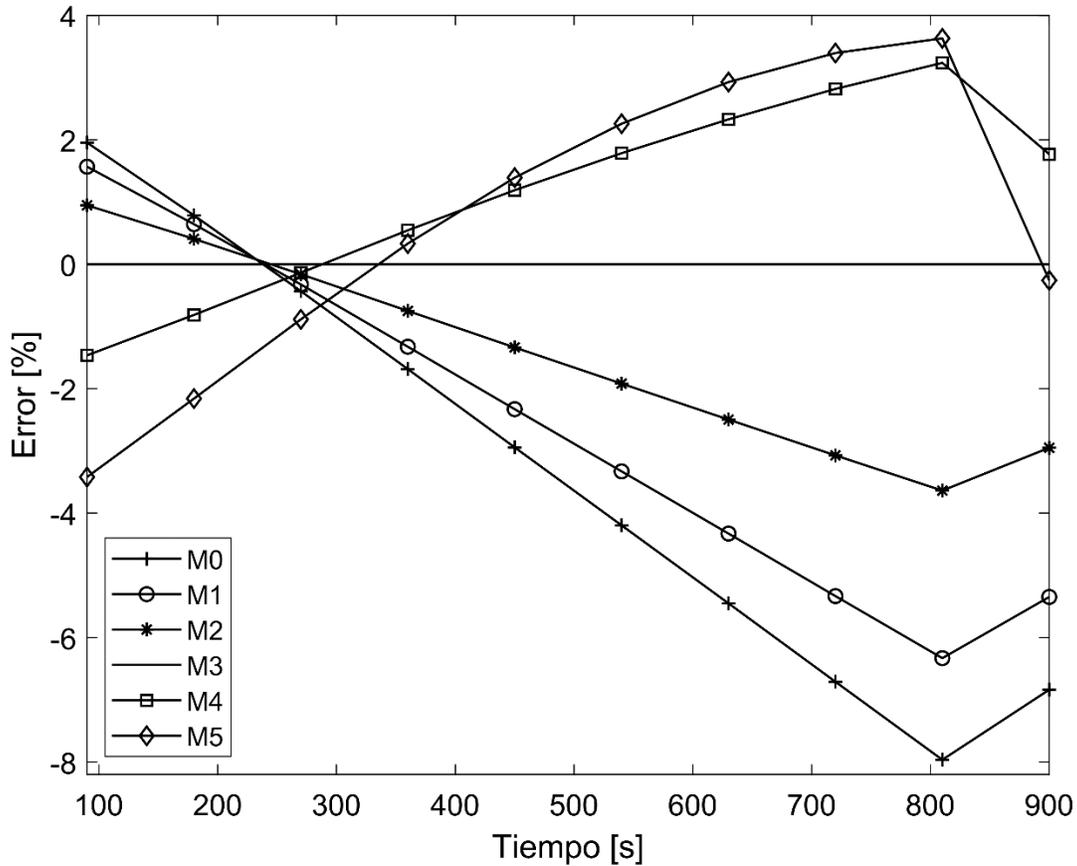


Figura 17: Evolución temporal de los errores porcentuales correspondientes a los momentos totales predichos por el modelo parametrizado. El error porcentual es calculado tomando el modelo explícito como referencia.

4.3. Resultados de la parametrización de sedimentación

El resultado directo de la parametrización del proceso de sedimentación gravitacional de gotas no son las cantidades totales tales como concentración o contenido de agua líquida, sino la evolución de los parámetros de las funciones de distribución que conforman la combinación lineal. A través de la evolución de dichos parámetros podemos determinar la forma del espectro de gotas para cada punto de rejilla, al integrar las funciones de distribución correspondientes.

4.3.1. Comparación de los espectros de gotas con la solución de referencia correspondiente

La Fig. 18 muestra una comparación entre los espectros de gotas derivados de la parametrización y aquellos obtenidos de la solución de referencia correspondiente en tres tiempos seleccionados. Los resultados se muestran para una altura de 8 km debido a su representatividad de los perfiles verticales del espectro de gotas. En la figura se aprecia que existe un excelente ajuste entre los resultados del modelo parametrizado y la solución de referencia correspondiente en todos los tiempos mostrados. Se observa una disminución en el radio medio de las gotas, ya que las gotas más grandes sedimentan más rápidamente que las pequeñas, alcanzando una altura menor a 8 km en los instantes de tiempo seleccionados. Transcurridos 300 s y 600 s , el radio medio es ligeramente menor que su valor inicial, ya que las gotas más pequeñas están alcanzando este nivel vertical. Además, se observa un estrechamiento del espectro con el tiempo, siendo particularmente evidente en la solución con una sola distribución (primera fila de la Fig. 18), producto de la reducción en la dispersión de los valores de radio medio. Este resultado es consistente con investigaciones previas y con la teoría de sedimentación gravitacional de gotas.

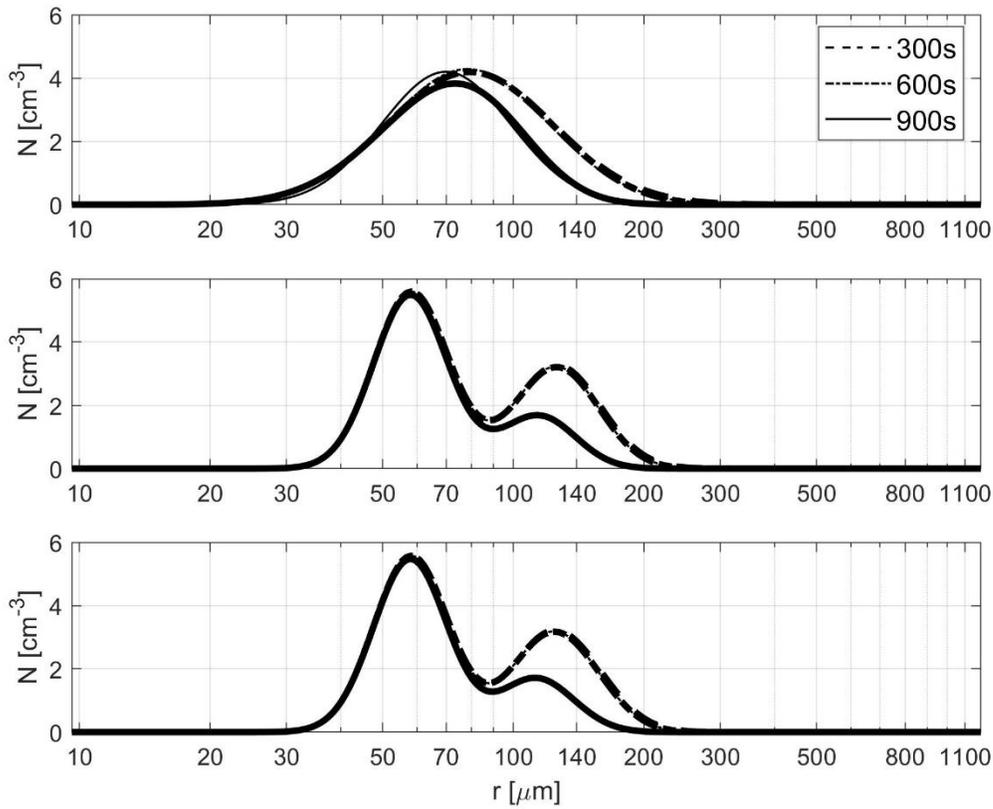


Figura 18: Evolución del espectro de gotas para IC-1 (primera fila), IC-2 (segunda fila) e IC-3 (tercera fila) a una altura de 8 km. La comparación se establece entre el modelo parametrizado (líneas delgadas) usando los momentos $M_0 - M_1 - M_2$ y la solución de referencia correspondiente (líneas gruesas).

4.3.2. Comparación de los perfiles verticales de las cantidades totales con la solución de referencia correspondiente

En esta sección se muestra la distribución de los perfiles verticales de las cantidades *bulk* fundamentales (concentración, contenido de agua líquida, radio medio y reflectividad), correspondientes a cada una de las tres condiciones iniciales empleadas, así como su comparación con las mismas variables obtenidas del modelo explícito correspondiente. Las cantidades totales del modelo parametrizado no se obtienen directamente (excepto concentración), sino que son calculadas a partir de los momentos totales correspondientes (23) usando los parámetros de cada distribución.

La Fig. 19 muestra cómo evolucionan los momentos de las distribuciones empleando IC-1. Todos los valores alcanzan una altura de 5 km, y por debajo de la misma todos los valores son muy

cercanos a cero, con excepción del radio medio. Los resultados muestran una buena precisión, especialmente la concentración y el contenido de agua líquida, los cuales muestran diferencias mínimas con la solución de referencia correspondiente para todos los tiempos y alturas. Este no es el caso para el radio medio, el cual sobrestima ligeramente la solución de referencia, aunque sí reproduce de manera adecuada la forma y alturas del perfil vertical. El efecto de clasificación por tamaños se encuentra bien representado en el modelo parametrizado, evidenciado por el incremento en los valores de radio medio de las gotas conforme disminuye la altura y se avanza en el tiempo. Un caso totalmente distinto es la reflectividad (Z), la cual se encuentra bien representada en la forma y alturas de los perfiles verticales, pero sobrestima claramente la escala de los valores de la solución de referencia correspondiente. Esto ocurre debido a la combinación de momentos empleada ($M_0 - M_1 - M_2$), la cual no incluye el momento de orden 6, por lo que este debe ser diagnosticado. Este resultado es consistente con los reflejados en (Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010), los cuales resaltan que si un momento estadístico diagnosticado cae fuera del rango de los momentos predichos, es normalmente sobrestimado. Por ello se puede afirmar que dentro del marco de la parametrización desarrollada, una formulación basada en una sola función de distribución con la combinación de momentos seleccionada no sería la adecuada para representar la reflectividad.

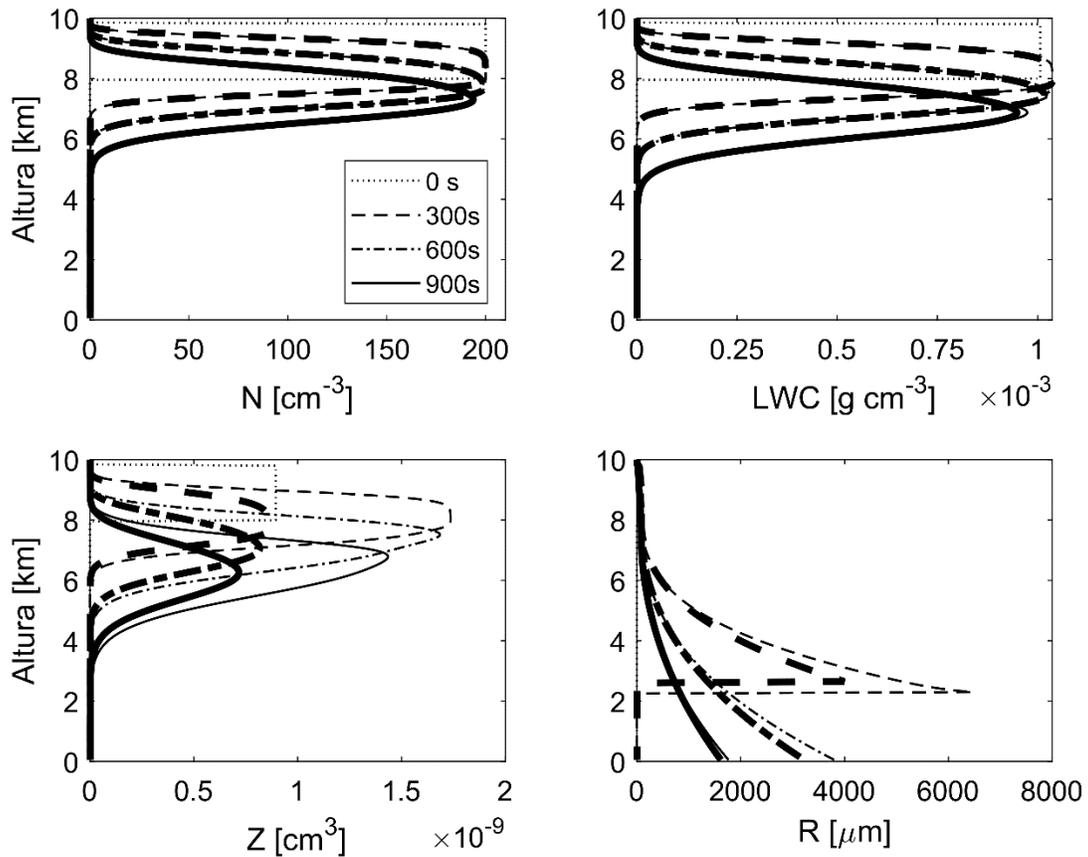


Figura 19: Perfiles verticales de concentración (N), contenido de agua líquida (LWC), reflectividad (Z) y radio medio (R) usando IC-1. La comparación se establece entre el modelo parametrizado (líneas delgadas) empleando los momentos $M_0 - M_1 - M_2$ y la solución de referencia correspondiente (líneas gruesas).

Los resultados para IC-2 se muestran en la Fig. 20. Es posible apreciar que los resultados del modelo parametrizado son muy similares a la solución de referencia correspondiente. Particularmente, los valores de radio medio y reflectividad muestran una mejora sustancial en su nivel de precisión en comparación con los resultados empleando IC-1 con la misma combinación de momentos, lo que conduce a la conclusión de que este modelo parametrizado híbrido es apto para reproducir de manera adecuada las cantidades totales con un alto grado de precisión.

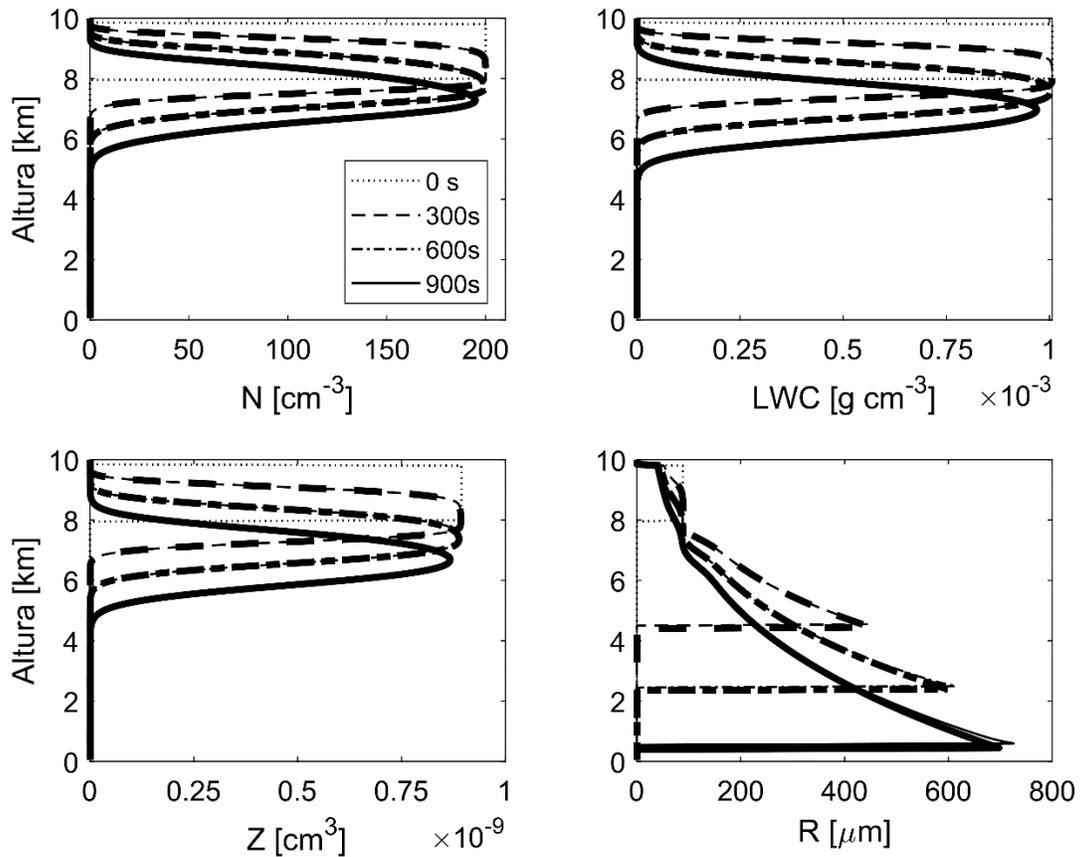


Figura 20: Igual a la Figura 19 pero empleando IC-2.

Además de los resultados previamente analizados, se realizó un experimento adicional con una combinación lineal de tres funciones de distribución (IC-3), usando los momentos $M_0 - M_1 - M_2$ en la formulación del modelo parametrizado. Los resultados obtenidos fueron ligeramente más precisos que los obtenidos con IC-2, pero reflejan un comportamiento muy semejante. Debido a la similitud entre los resultados, estos no son mostrados en el presente trabajo.

4.3.3. Comparación de los espectros de gotas con la solución de referencia compleja

Para obtener los siguientes resultados, el modelo explícito fue inicializado con una combinación lineal de tres funciones de distribución, con el objetivo de establecer la efectividad del modelo parametrizado para representar la evolución de un espectro de gotas complejo, los cuales usualmente se encuentran en los fenómenos naturales. Se emplearon las mismas condiciones iniciales para homogenizar la comparación. Además, se emplearon dos combinaciones distintas de momentos estadísticos en la parametrización ($M_0 - M_1 - M_2$ y $M_0 - M_3 - M_6$).

En la Fig. 21 se puede observar que, al usar IC-1, el espectro con un solo modo es más ancho que la solución de referencia compleja, lo que indica un intento por parte del modelo parametrizado de reproducir un espectro de gotas bimodal. El espectro se vuelve más estrecho transcurridos 900 s de simulación, debido al efecto de clasificación por tamaños. Una descripción más precisa de la solución de referencia correspondiente se alcanza al emplear IC-2 e IC-3, siendo este último el más preciso, aunque las diferencias son despreciables.

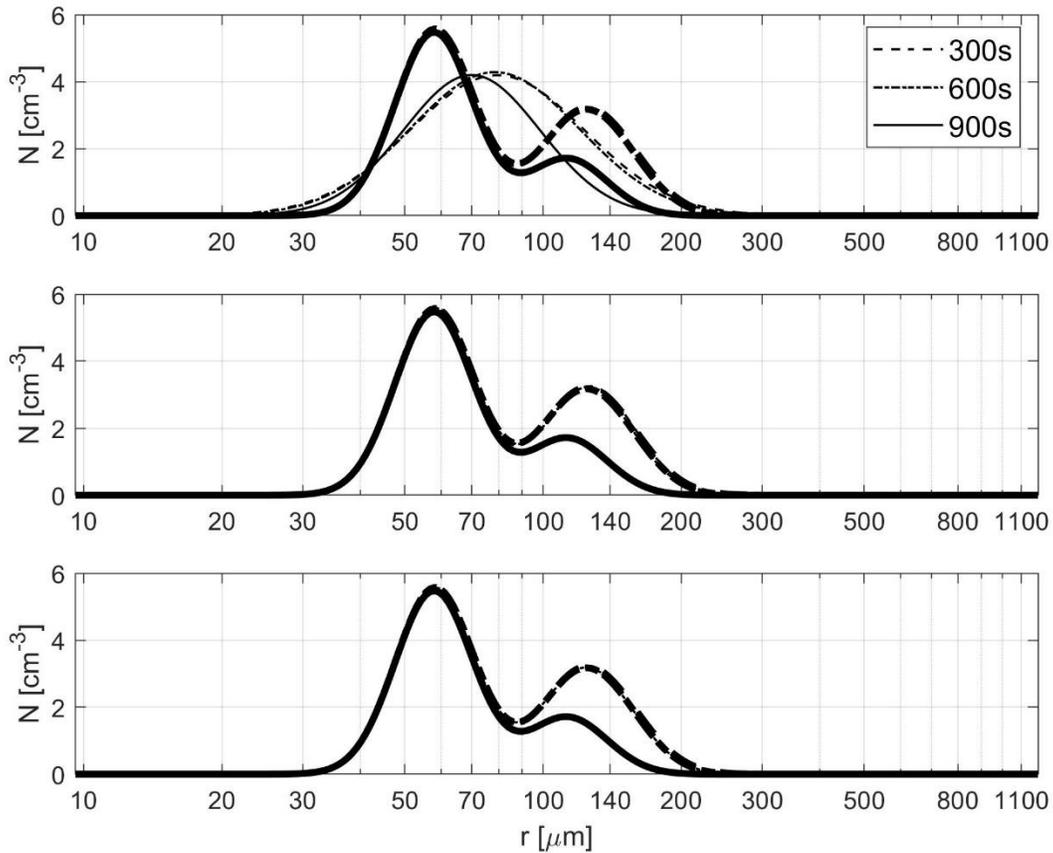


Figura 21: Evolución del espectro de gotas para IC-1 (primera fila), IC-2 (segunda fila) e IC-3 (tercera fila). La comparación se establece entre el modelo parametrizado (líneas delgadas) empleando los momentos $M_0 - M_3 - M_6$ y la solución de referencia correspondiente (líneas gruesas).

En la Fig. 22 se observa un comportamiento similar al descrito anteriormente, Sin embargo, el empleo de la combinación de momentos $M_0 - M_3 - M_6$ resulta en mayores valores de concentración y radio medio al inicializar el modelo con IC-1, lo que indica una sobrestimación de las cantidades *bulk* fundamentales. Además, el modelo parametrizado genera espectros de gotas

más estrechos desde el inicio de la simulación, por lo tanto, el modelo con una sola distribución empleando los momentos $M_0 - M_3 - M_6$ no es la mejor opción para reproducir un espectro de gotas complejo. Sin embargo, al inicializar el modelo parametrizado con IC-2 e IC-3, la precisión mejora de manera sustancial, por lo que el empleo de un modelo parametrizado formulado en base a una combinación lineal de dos o tres funciones de distribución es adecuado para representar espectros de gotas complejos. Este resultado representa un logro importante, ya que los métodos *bulk* tradicionales normalmente representan de manera adecuada un conjunto limitado de momentos estadísticos de las distribuciones, pero no son precisos al reproducir la forma espectral de la solución de referencia.

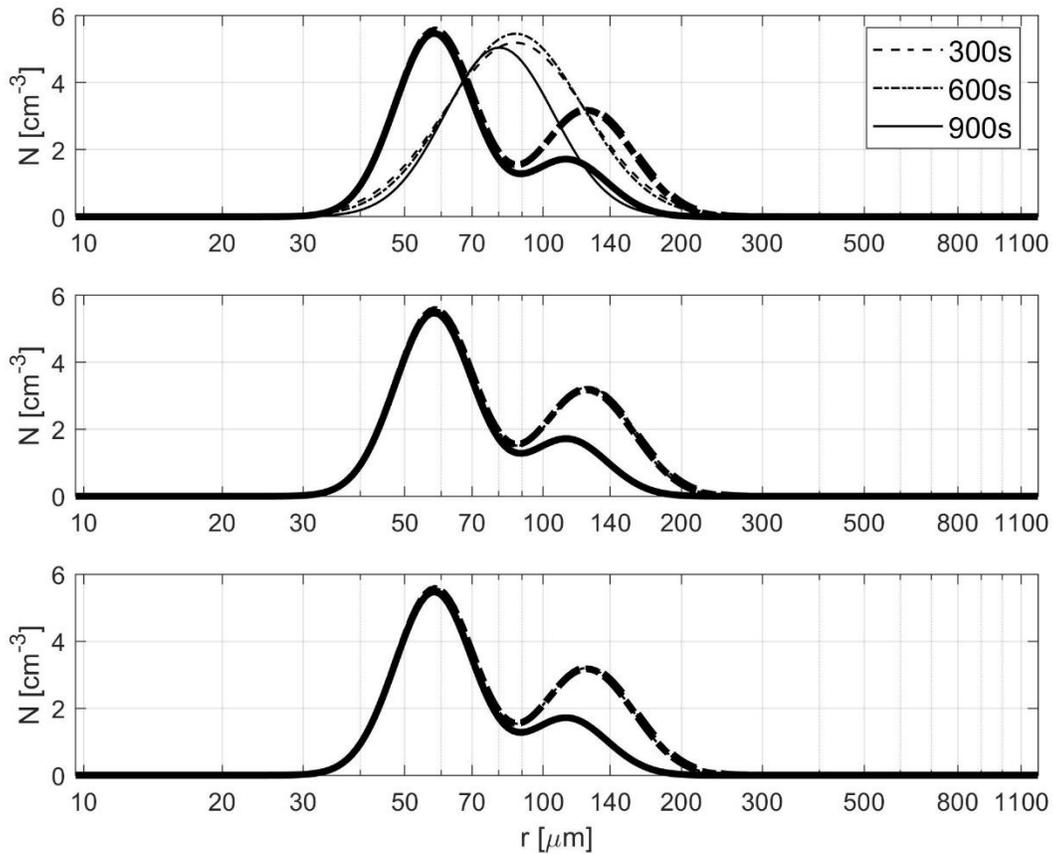


Figura 22: Igual a la Figura 21, pero empleando los momentos $M_0 - M_3 - M_6$.

4.3.4. Comparación de los perfiles verticales de las cantidades totales con la solución de referencia compleja

En esta sección se establece una comparación entre las cantidades *bulk* obtenidas del modelo parametrizado y las obtenidas de la solución de referencia compleja. Se emplean las condiciones iniciales IC-1, IC-2 e IC-3, así como las combinaciones de momentos $M_0 - M_1 - M_2$ y $M_0 - M_3 - M_6$.

En la Fig. 23 es posible observar que, mientras los valores de concentración son muy precisos, el resto de las cantidades *bulk* son sobrestimadas. En los casos de contenido de agua líquida y reflectividad, este fenómeno es producto de la combinación de momentos empleada en el experimento ($M_0 - M_1 - M_2$). Este efecto es acentuado en el cálculo de la reflectividad, con valores que superan en más del doble a los de la solución de referencia compleja, aunque las alturas de los perfiles están pronosticadas de manera adecuada.

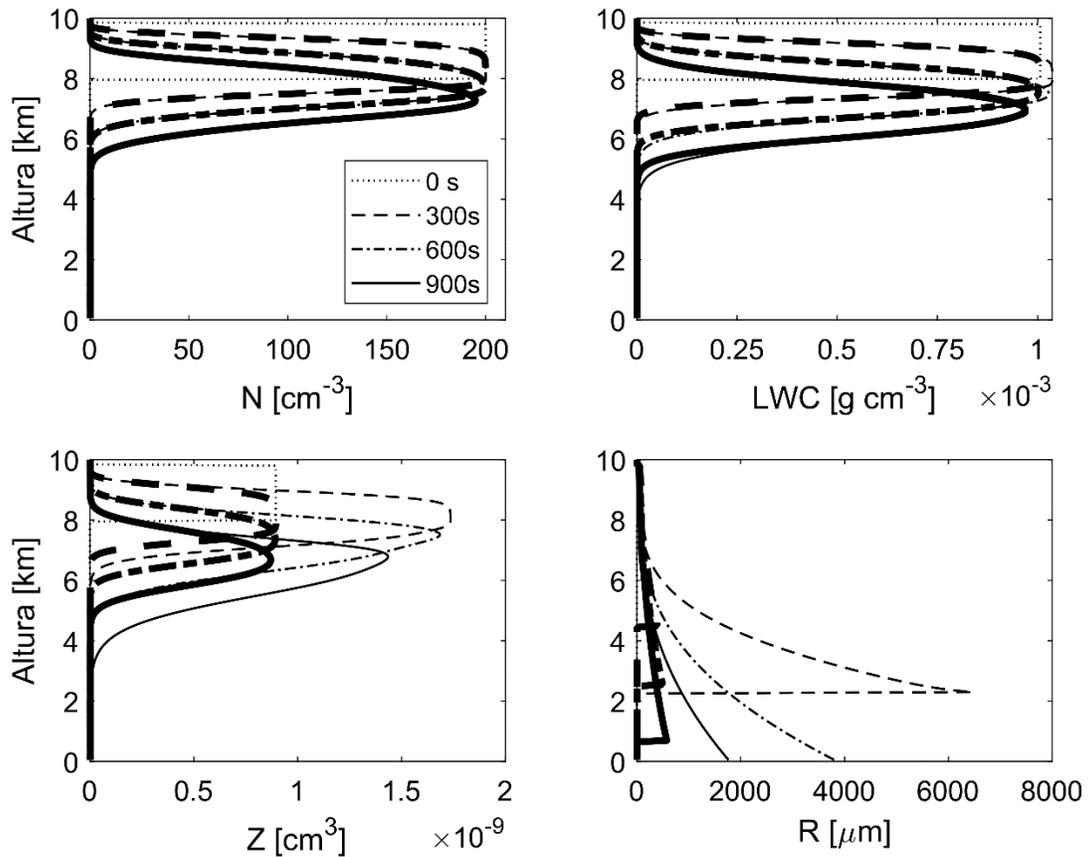


Figura 23: Perfiles verticales de concentración (N), contenido de agua líquida (LWC), reflectividad (Z) y radio medio (R) empleando IC-1. La comparación se establece entre el modelo parametrizado (líneas delgadas) usando $M_0 - M_1 - M_2$ y la solución de referencia compleja (líneas gruesas).

Este no es el caso cuando usamos IC-1 con los momentos $M_0 - M_3 - M_6$ (Fig. 24), donde el contenido de agua líquida y los valores de reflectividad son pronosticados correctamente. Sin embargo, la concentración se sobrestima ligeramente, y se mantienen los errores en el cálculo del radio medio. Estos errores son causados al intentar reproducir un espectro complejo con una parametrización de una sola función de distribución.

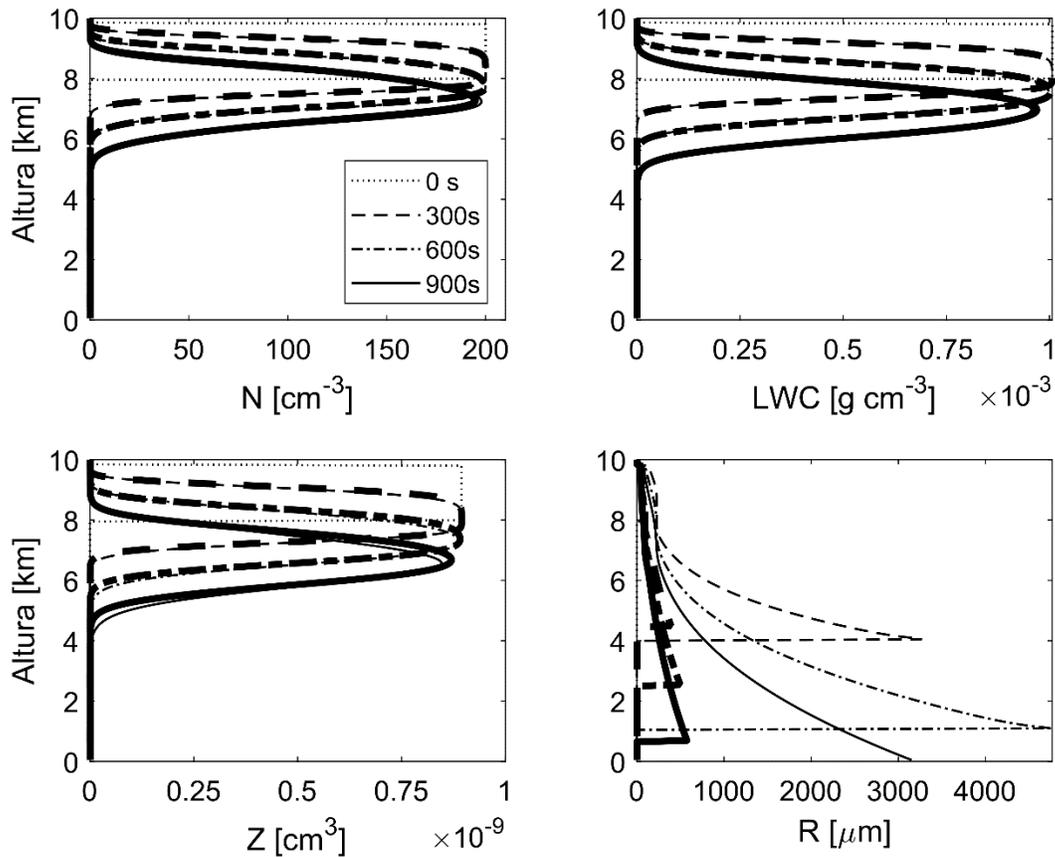


Figura 24: Igual a la Figura 23, pero usando los momentos $M_0 - M_3 - M_6$.

Al inicializar el modelo parametrizado con IC-2 y empleando $M_0 - M_1 - M_2$ (Fig. 25), se obtiene una mejora generalizada en los resultados de los momentos pronosticados y diagnosticados. Los valores de reflectividad y radio medio en particular, muestran un alto grado de ajuste a la solución de referencia compleja. En el caso de la reflectividad, la inclusión de una función de distribución adicional es crítica para la mejoría en su diagnóstico. Lo mismo aplica para el radio medio, la cual es una variable fundamental en este modelo parametrizado, al ser la variable independiente en la definición de la distribución log-normal empleada. A pesar de ello, esta última variable sigue siendo ligeramente sobrestimada por el modelo parametrizado.

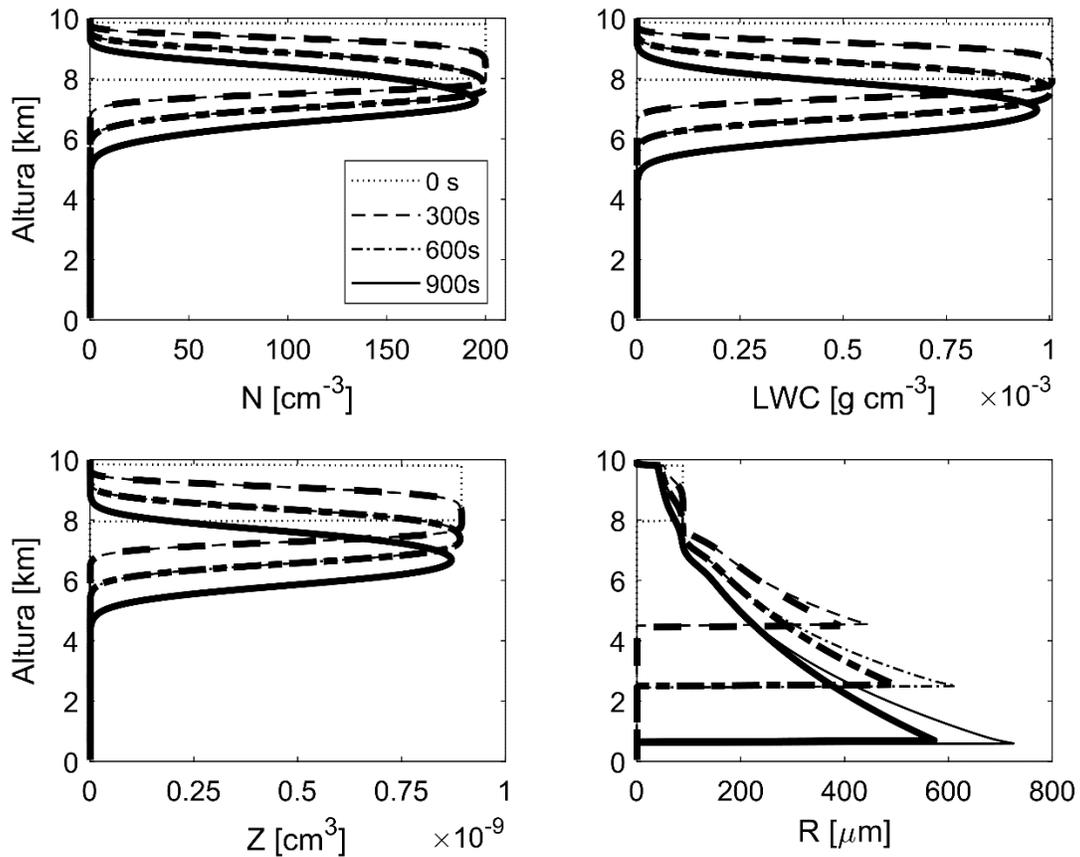


Figura 25: Perfiles verticales de concentración (N), contenido de agua líquida (LWC), reflectividad (Z) y radio medio (R) empleando IC-2. La comparación se establece entre el modelo parametrizado (líneas delgadas) usando $M_0 - M_1 - M_2$ y la solución de referencia compleja (líneas gruesas).

En la Fig. 26 se observa el caso contrario en el comportamiento del radio medio de las gotas. Se aprecia que al inicializar el modelo con IC-2 empleando los momentos $M_0 - M_3 - M_6$ se sobrestima la solución de referencia compleja en casi tres veces su valor. El resto de las variables mostradas reproducen la solución de referencia compleja de manera adecuada.

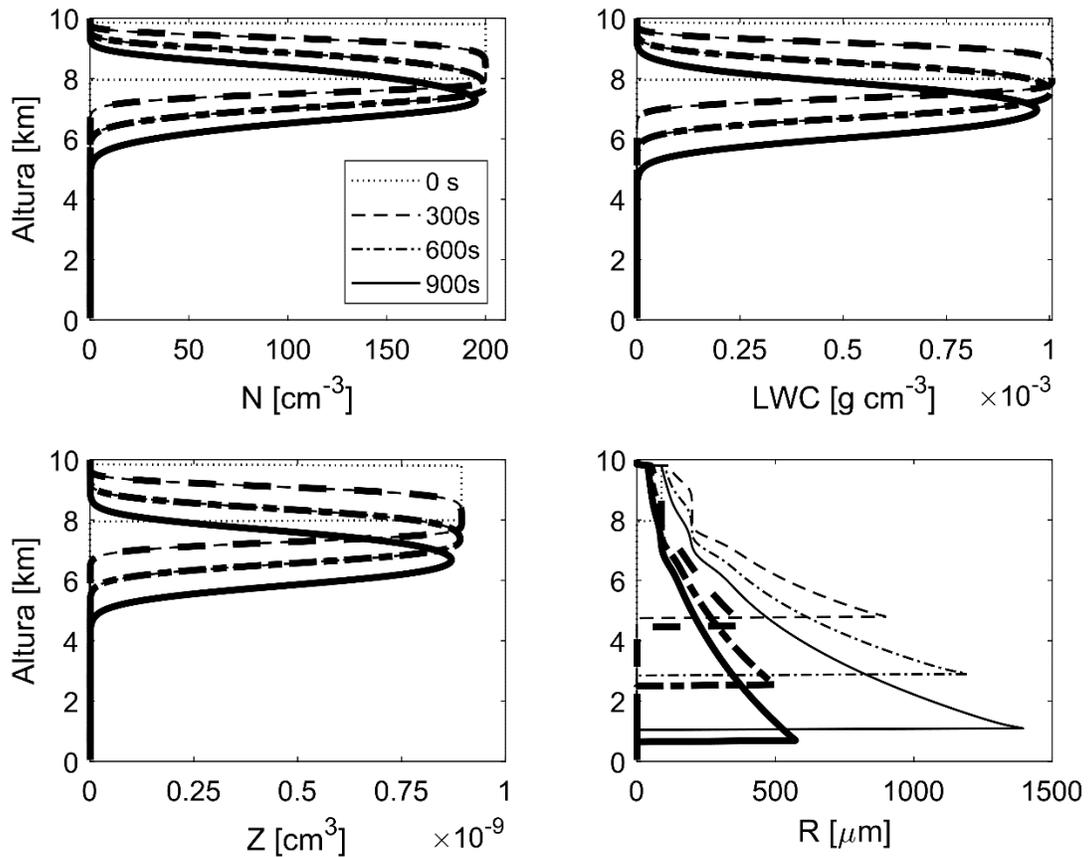


Figura 26: Igual a la Figura 25, pero usando los momentos $M_0 - M_3 - M_6$.

La Fig. 27 reafirma los resultados mostrados previamente, con la diferencia que el valor pronosticado del radio medio ya no sobrestima la solución de referencia correspondiente. Además, se observa una ligera, aunque generalizada, mejoría en el comportamiento del resto de las variables analizadas. La figura correspondiente al experimento usando IC-3 y los momentos $M_0 - M_3 - M_6$ ha sido omitida debido a su similitud con la Fig. 26.

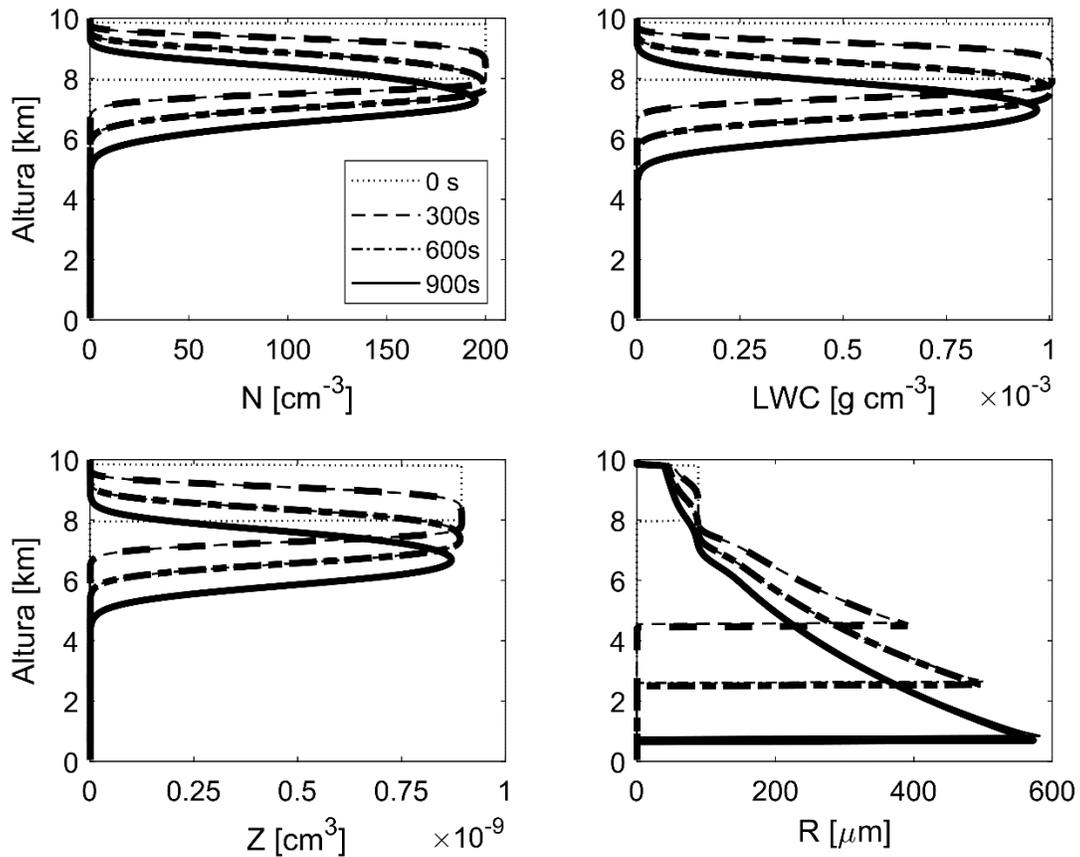


Figura 27: Perfiles verticales de concentración (N), contenido de agua líquida (LWC), reflectividad (Z) y radio medio (R) empleando IC-3. La comparación se establece entre el modelo parametrizado (líneas delgadas) usando $M_0 - M_1 - M_2$ y la solución de referencia compleja (líneas gruesas).

Los resultados analizados en esta sección demuestran que es posible reproducir un espectro de gotas complejo empleando el modelo parametrizado propuesto, con un alto grado de precisión. Los mejores resultados fueron obtenidos con un número similar de funciones de distribución en el modelo parametrizado y en el modelo explícito para tres funciones de distribución. Sin embargo, al emplear una parametrización que incluye dos funciones de distribución se obtuvieron resultados satisfactorios con una precisión razonable, y la consiguiente disminución del costo computacional del modelo desarrollado.

4.3.5. Errores en el cálculo de los momentos totales por sedimentación

Las Figuras 28, 29 y 30 muestran los errores normalizados en el cálculo de los momentos estadísticos de las distribuciones, al usar el modelo parametrizado con dos combinaciones de

momentos diferentes ($M_0 - M_1 - M_2$ y $M_0 - M_3 - M_6$), inicializando el modelo con IC-1, IC-2 e IC-3. Se emplea la solución de referencia compleja para el cálculo de los errores.

En la Fig. 28 se aprecia que existe un buen ajuste entre los momentos calculados por la parametrización y la referencia, especialmente en la parte más alta del dominio de simulación. Sin embargo, dichos errores se incrementan en los alrededores de las regiones con alto gradiente, producto de la rápida variación de los momentos de la solución de referencia compleja. En estas zonas los momentos tienden a ser sobrestimados. Se observa una clara distinción entre las simulaciones realizadas con diferentes combinaciones de momentos. Los errores en las simulaciones con los momentos $M_0 - M_3 - M_6$ se encuentran más distribuidos en la vertical debido a la mayor velocidad terminal de los momentos involucrados, mientras que los errores de las simulaciones con los momentos $M_0 - M_1 - M_2$ se encuentran más concentrados en área. Las gráficas demuestran que existe un mayor error en los momentos a partir del orden 3 al usar $M_0 - M_1 - M_2$ (lo cual es consistente con su formulación), especialmente en el momento de orden 6. Esto se traduce en un pronóstico deficiente de la reflectividad, como se muestra en la Fig. 23.

En las simulaciones empleando los momentos $M_0 - M_3 - M_6$ los errores normalizados están más distribuidos espacialmente, lo que implica que la región de alto gradiente es más amplia al usar estos momentos. Sin embargo, los momentos de orden 3 y 6 son pronosticados correctamente. De manera general, los errores normalizados tienden a aumentar mientras nos trasladamos a menores alturas en el dominio de simulación. Sin embargo, como los valores son muy cercanos a cero en esa zona, estos errores no son representativos de un problema en la formulación y desarrollo de la parametrización de sedimentación, sino que simplemente son amplificadas por el algoritmo de normalización. La combinación de momentos $M_0 - M_3 - M_6$ muestra la mayor precisión al emplear una sola distribución en la parametrización, lo que reafirma los resultados mostrados en la Fig. 24.

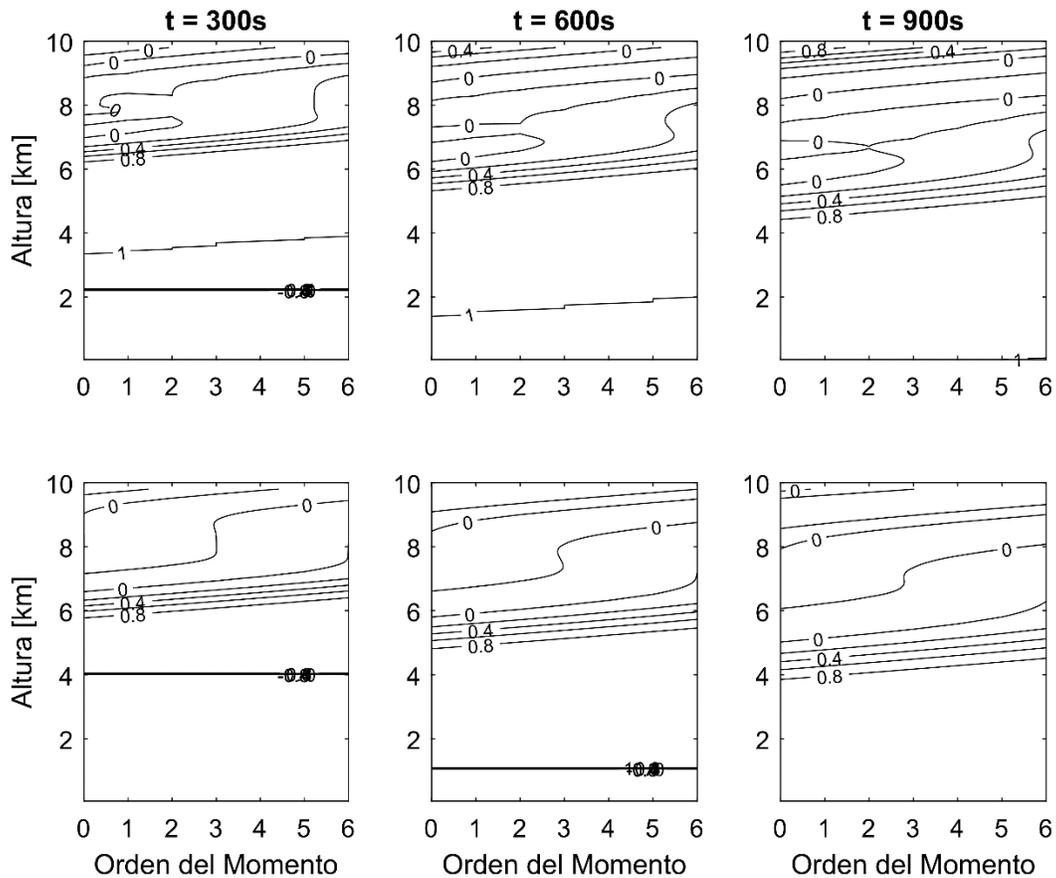


Figura 28: Errores normalizados de los momentos totales calculados empleando IC-1. La primera fila corresponde a las simulaciones con los momentos $M_0 - M_1 - M_2$, mientras que la segunda fila corresponde a las simulaciones con los momentos $M_0 - M_3 - M_6$.

El mismo análisis es aplicable a las Figuras 29 y 30, con la clara distinción de que los momentos calculados son reproducidos con mayor precisión a medida que se añaden más funciones de distribución al modelo parametrizado. Además, la dispersión vertical de los errores es más homogénea, limitando la disparidad entre los resultados que emplean diferentes combinaciones de momentos en su formulación. Los gráficos muestran que, al agregar más distribuciones, los resultados empleando los momentos $M_0 - M_1 - M_2$ se convierten en más precisos que la formulación con los momentos $M_0 - M_3 - M_6$, aunque las discrepancias son lo suficientemente pequeñas como para no representar una diferencia práctica en su uso, dadas las condiciones de las simulaciones presentadas.

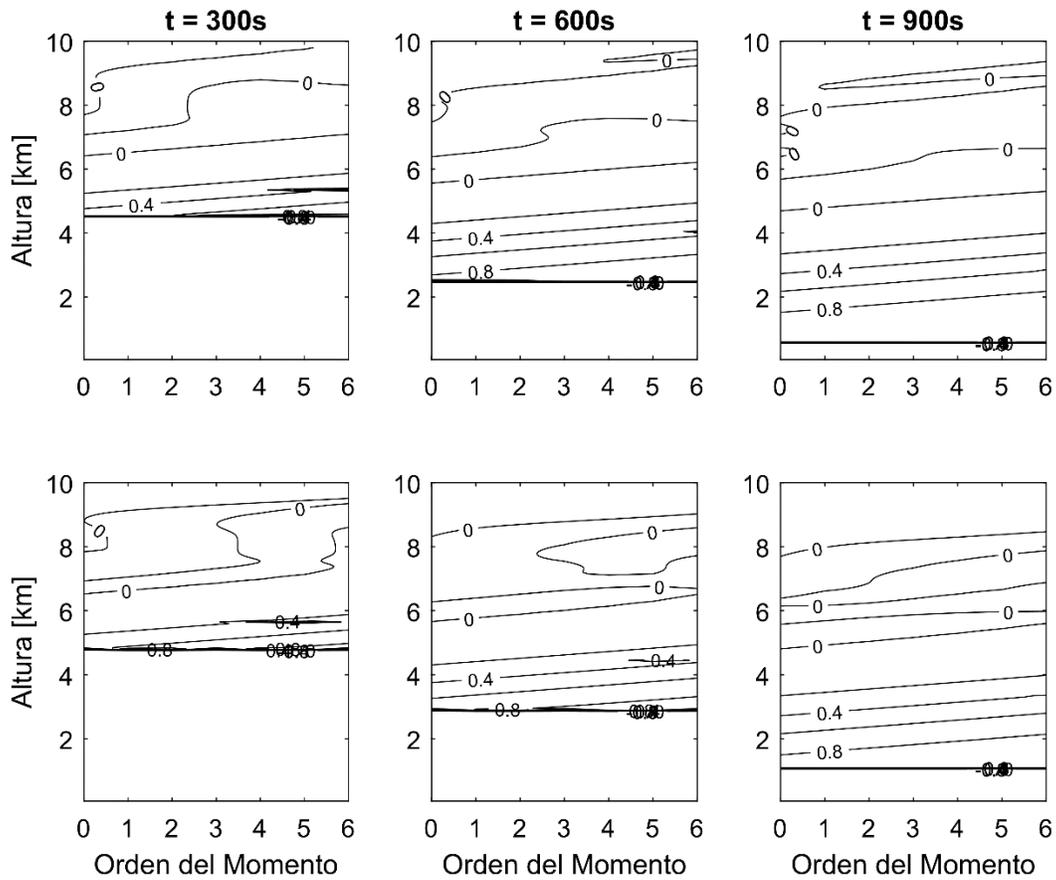


Figura 29: Igual a la Figura 28, pero usando IC-2.

El incremento de los errores normalizados en el cálculo de los momentos de orden superior a 3 se mantienen en las simulaciones empleando IC-2 y $M_0 - M_1 - M_2$ (Fig. 29); sin embargo, estas discrepancias desaparecen al emplear IC-3. Adicionalmente, las simulaciones inicializadas con IC-3 (Fig. 30) muestran que los errores normalizados para todos los momentos son cercanos a cero en casi todo el dominio vertical, excepto en las regiones de alto gradiente.

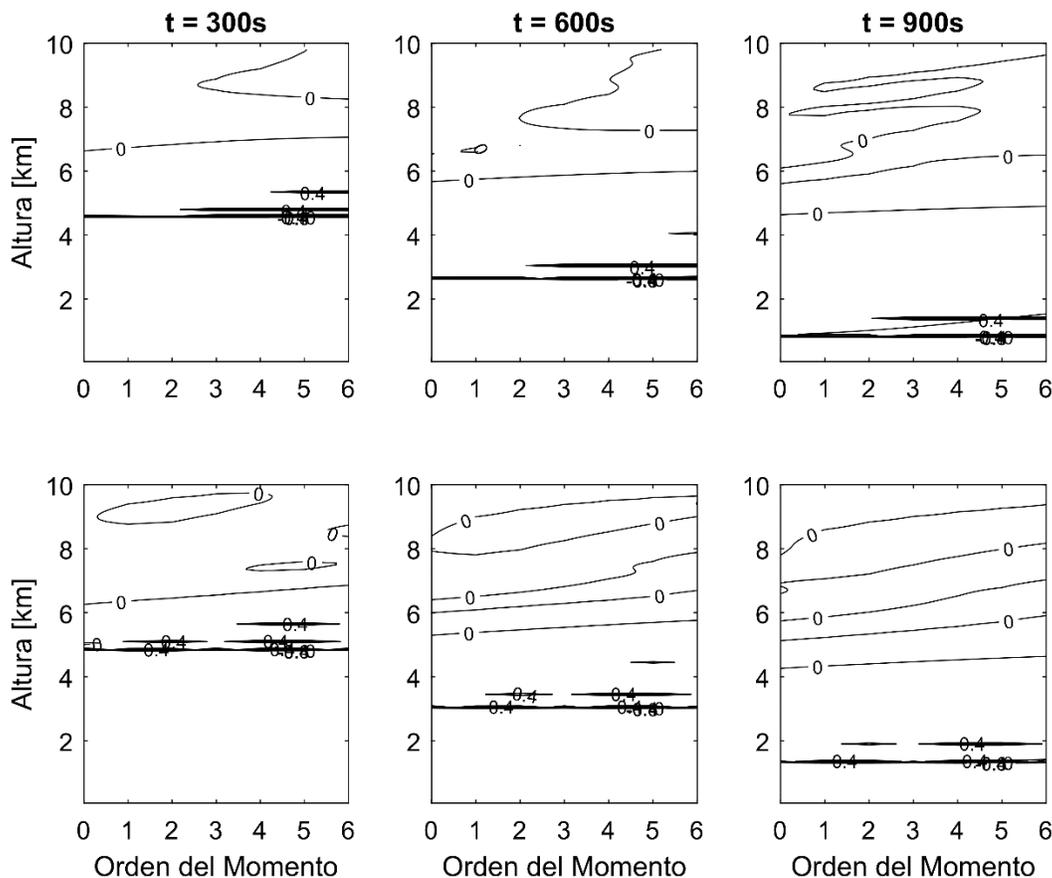


Figura 30: Igual a la Figura 28, pero usando IC-3.

4.4. Perspectivas de acoplamiento de los diferentes procesos microfísicos en el marco de la metodología de funciones base

En el presente trabajo se exponen las parametrizaciones y resultados de los procesos de condensación, colisión-coalescencia y sedimentación gravitacional como módulos separados. Sin embargo, se realizó de manera satisfactoria (y a modo de prueba) un acoplamiento entre los módulos de condensación y colisión-coalescencia. Dichos resultados no fueron mostrados ya que escapan del objetivo del presente trabajo, y pueden ser encontrados en (Clark, 1976).

4.4.1. Estabilidad numérica del sistema de ecuaciones

Al intentar el acoplamiento del módulo de sedimentación con el resto de los procesos, se encuentran grandes inestabilidades la solución del sistema de ecuaciones definido en (25). Esto es

producto de la misma naturaleza del sistema, el cual posee por definición un número de condición muy grande (del orden de 10^4), como se muestra en la Figura 31.

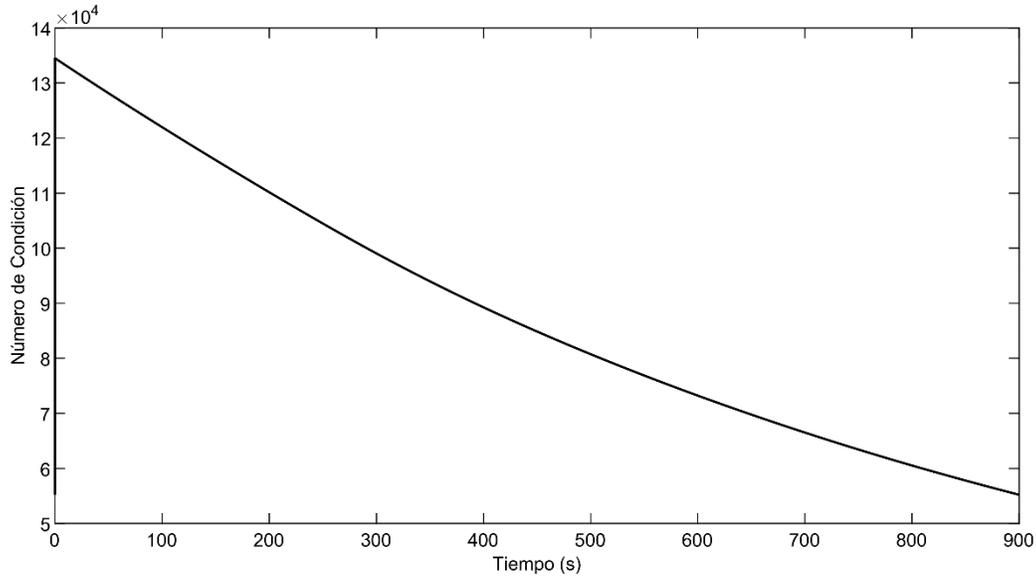


Figura 31: Evolución en el tiempo del número de condición del sistema de ecuaciones (25), en la solución del proceso de colisión-coalescencia.

En la Figura 35 se muestra el orden de magnitud del número de condición del sistema de ecuaciones (25) durante toda la simulación del proceso de colisión-coalescencia. Se aprecia que, a pesar de que disminuye de manera continua, siempre mantiene un orden de magnitud afuera de los límites de un comportamiento estable. A pesar de este hecho, como los cambios en el vector independiente que contiene las tendencias de los momentos totales (\mathbf{F}) son lo suficientemente pequeños, esta inestabilidad intrínseca no afecta la solución al acoplar los procesos de condensación y colisión-coalescencia, ni ambos por separado.

Sin embargo, al intentar acoplar los módulos de condensación y colisión-coalescencia con el proceso de sedimentación, los fuertes gradientes que provoca la introducción de una dimensión espacial en el modelo son lo suficientemente grandes como para propagarse, incrementarse, e inestabilizar la solución del modelo a tal punto que es imposible obtener una solución numérica.

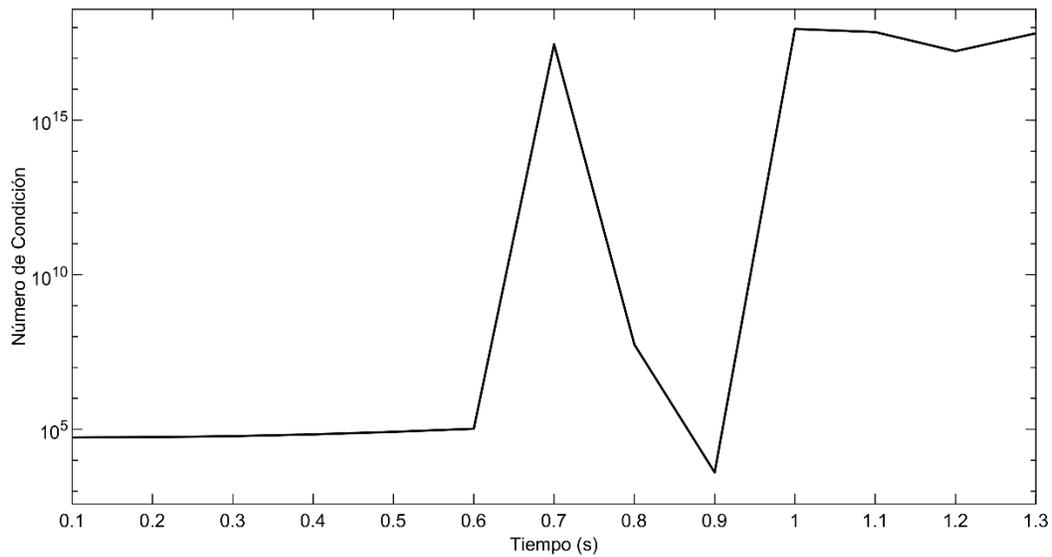


Figura 32: Evolución temporal del número de condición durante el acoplamiento de los procesos de colisión-coalescencia y sedimentación.

Como se observa en la Figura 32, al acoplar los módulos de colisión-coalescencia y sedimentación, se inestabiliza la solución del sistema de ecuaciones, con el número de condición alcanzando valores del orden de 10^{18} . Por ello, podemos concluir que ambos módulos no son compatibles bajo la presente formulación, necesitando más trabajo de investigación para acoplarlos de manera satisfactoria.

4.4.2. Sobre el acoplamiento

Para solucionar el problema de la inestabilidad intrínseca en la construcción del sistema de ecuaciones, Clark y Hall abordaron el problema desde un punto de vista matemático, empleando un proceso de minimización de los errores incurridos, empleando el método de minimizadores de Lagrange (Clark & Hall, 1983). Con dicha metodología se logró eliminar la necesidad de solucionar el sistema de ecuaciones, sustituyéndolo por un problema de minimización del error numérico incurrido en el cálculo de los parámetros. Sin embargo, no fue incluido el proceso de sedimentación de gotas, limitando su uso al proceso de colisión-coalescencia. Dicha metodología es compatible con las nuevas herramientas disponibles de Machine Learning. En particular, la aplicación de redes neuronales es especialmente adecuada para problemas de minimización de funciones no lineales. Por ello, se recomienda expandir los enfoques del presente estudio, para incluir la aplicación de ML a la parametrización basada en la metodología de minimizadores de Lagrange.

Bajo diferentes condiciones, Feingold logró unificar la filosofía de modelación expuesta en (Clark, 1976) con el proceso de sedimentación de gotas. Dado que tanto los espectros de gotas de nubes como de gotas de lluvia son descritos completamente con la combinación lineal de funciones base, el proceso de sedimentación consiste en dividir el espectro en secciones individuales y dejar que cada sección caiga a la velocidad terminal adecuada (Feingold et al., 1998). La división del espectro en secciones requiere el cálculo de funciones de error para funciones de base lognormal. Dado que estos deben calcularse en cada punto de la malla y en cada paso de tiempo, el cálculo es muy costoso. En la propuesta de Feingold, se realiza la división del espectro en secciones a priori, para un rango de tamaños de gota promedio y parámetros de las distribuciones, resultados que se almacenan en tablas de búsqueda. Una vez realizado, es posible emplear un esquema advectivo simple, monótono y conservador (Feingold et al., 1998).

Otra posibilidad de aplicación del módulo de sedimentación de gotas desarrollado en el marco de microfísica de nubes es el caso inverso al propuesto por Feingold. Dicha parametrización es compatible con modelos explícitos de colisión-coalescencia, ofreciendo un marco dinámico preciso a los modelos tipo *bin*.

5. Conclusiones

Se desarrollaron e implementaron tres parametrizaciones basadas en la metodología de funciones base expresada por primera vez en (Clark, 1976) para la mayoría de los procesos microfísicos que ocurren en el interior de las nubes calientes: condensación, colisión-coalescencia y sedimentación gravitacional de gotas. Dichas parametrizaciones tienen como factor común el uso de una combinación lineal de funciones de distribución log-normales, las cuales mostraron un grado razonable de precisión al ser comparadas con los resultados de modelos de microfísica explícita.

En el caso de crecimiento de gotas por difusión de vapor de agua (condensación), la parametrización desarrollada siguió fielmente los principios de la formulación de (Clark, 1976), mostrando resultados prometedores al compararse con el modelo explícito desarrollado en (Kovetz & Olund, 1969) y perfeccionado en (Ogura & Takahashi, 1973). Este modelo parametrizado permite el crecimiento de gotas por condensación de manera continua, reflejando de manera adecuada la importancia de este proceso en las fases iniciales de formación de nubes y precipitación.

En el caso de la parametrización del proceso de colisión-coalescencia, se desarrolló un modelo híbrido entre la microfísica explícita y *bulk*, basado en la combinación lineal de funciones base, con todos los parámetros de las distribuciones calculados a partir de las tendencias totales de los momentos de las distribuciones log-normales empleadas, sin usar ningún parámetro fijo a priori, y empleando un mecanismo de control de la eficiencia de colisión de las gotas (Hall, 1980). Las tendencias de los momentos totales fueron calculadas aplicando la metodología de Machine Learning, al entrenar y usar activamente 5 redes neuronales incluidas en la implementación del modelo parametrizado. Se realizó un experimento para determinar el comportamiento del modelo basado en ML en las etapas iniciales de formación de las nubes. Los resultados de la simulación mostraron buena precisión al ser comparados con el modelo explícito desarrollado en (Bott, 1998), tanto para los espectros de gotas como para las cantidades microfísicas totales. Las tendencias de los momentos totales de las distribuciones fueron pronosticadas correctamente al usar un modelo basado en redes neuronales, las cuales mejoraron la precisión del modelo parametrizado, así como disminuyeron el costo computacional de la formulación original para el proceso de colisión-coalescencia. El análisis del error porcentual incurrido en el cálculo de los momentos mostró una precisión razonable, ya que nunca se alcanzó el umbral de 10 % de error absoluto en toda la

simulación. Sin embargo, se recomienda entrenar las redes neuronales empleadas considerando una resolución mayor para los valores de los parámetros de entrenamiento, así como incluir un mayor rango de valores de los parámetros de las distribuciones que describan un mayor número de posibles combinaciones que pueden estar presentes en las nubes calientes. Además, el uso de ML eliminó el requisito de la formulación original de integrar numéricamente las tendencias de los momentos totales en cada paso de tiempo, o el uso de tablas de búsqueda que reducen la precisión de la parametrización por los algoritmos de interpolación que emplean usualmente. También, este modelo parametrizado es independiente del kernel de colisión empleado, siendo posible usar un kernel polinomial o uno dinámico de manera indistinta, estructuralmente hablando, ya que existen consideraciones físicas realistas que determinan el mejor tipo de kernel a emplear en dependencia de las aplicaciones y fenómenos objetivo de simulación.

Además, se desarrolló e implementó una parametrización para el proceso de sedimentación gravitacional de gotas, basada en la misma metodología de funciones base, con todos los parámetros de las distribuciones calculados a partir de la evolución de un conjunto de tres momentos predeterminados por lo que no se admite ningún parámetro fijo. Se realizaron dos grupos de experimentos con las mismas condiciones iniciales y un número creciente de funciones de distribución hasta alcanzar un máximo de tres (los métodos *bulk* tradicionales usualmente incluyen hasta dos funciones de distribución truncadas). El primer grupo de experimentos incluyó los momentos $M_0 - M_1 - M_2$, con el objetivo de determinar la precisión de la parametrización para reproducir una solución de referencia equivalente (con el mismo número de funciones de distribución). La principal ventaja observada en el uso de varias funciones de distribución fue una mejor descripción de la forma del espectro de gotas, con una marcada tendencia a adoptar una forma bimodal, y la flexibilidad de adaptar el modelo parametrizado para describir los resultados obtenidos a partir de observaciones o campañas de recolección de datos, a través de una combinación lineal de funciones de distribución. Los resultados mostraron un buen desempeño con la solución explícita, demostrando la precisión de la parametrización. A pesar del creciente número de momentos calculados, esta parametrización permite el cálculo preciso de la evolución de cualquier espectro de gotas (por sedimentación), a través de la evolución de sus parámetros, de una forma más eficiente que resolviendo un modelo espectral.

El segundo grupo de experimentos comparó las soluciones del modelo parametrizado usando dos combinaciones diferentes de momentos en su formulación ($M_0 - M_1 - M_2$ y $M_0 - M_3 - M_6$), con una solución de referencia compleja (inicializada con tres funciones de distribución en todos los casos), con el objetivo de determinar la habilidad de la parametrización para reproducir espectros de gotas complejos. Adicionalmente, se llevó a cabo un estudio comparativo para determinar cuál combinación de momentos se comporta mejor dentro del marco de esta parametrización. El único estudio previo de este tipo fue desarrollado en (Milbrandt & McTaggart-Cowan, 2010), y no es aplicable a la presente parametrización, sino a esquemas parametrizados tradicionales. Los mejores resultados fueron obtenidos usando la combinación de momentos $M_0 - M_1 - M_2$ en un modelo parametrizado que incluya tres funciones de distribución para describir el espectro de gotas. Sin embargo, las diferencias de esta combinación con un modelo que emplee los momentos $M_0 - M_3 - M_6$ y dos funciones de distribución fueron lo suficientemente pequeñas como para no representar una diferencia práctica en su uso. La excepción a esta conclusión es para el cálculo del radio medio de las gotas, el cual es calculado de manera muy precisa al usar la combinación de momentos $M_0 - M_1 - M_2$ y tres funciones de distribución. La principal importancia de esta parametrización de sedimentación es que establece un marco dinámico para la metodología de funciones base de manera general. Estos resultados pueden encontrarse publicados en (Rodríguez-Genó & Alfonso, 2021b).

De manera general, la metodología de funciones base representa un híbrido entre los modelos parametrizados tradicionales y la microfísica explícita. Al calcular la evolución de los parámetros de las funciones de distribución involucradas a partir de los cambios en los momentos totales, este tipo de modelos permite la variación de la totalidad de los parámetros, sin necesidad de fijar ninguno para cerrar el sistema de ecuaciones, como es el caso de la distribución gamma en esquemas de dos momentos. Además, al contar con todos los parámetros actualizados permite un seguimiento adecuado del espectro de gotas en lugar de momentos específicos representativos de variables físicas. También, en el marco de esta metodología, no hay necesidad de una división artificial del espectro de gotas, por lo que los términos gotas de nubes y gotas de lluvia pierden significado, ya que sólo hay “gotas”. Con el objetivo de desarrollar un modelo completo de nubes calientes, se recomienda extender la metodología de ML aplicada al proceso de colisión-coalescencia (Rodríguez-Genó & Alfonso, 2021a) a los procesos de condensación y sedimentación gravitacional de gotas, siguiendo la metodología de funciones base, lo cual será objetivo de futuras

investigaciones. Un modelo de nubes de este tipo podría ser implementado en modelos numéricos climáticos y regionales, ya que las condiciones iniciales que emplea son las mismas que deben ser utilizadas en parametrizaciones microfísicas tradicionales actualmente en uso.

6. Bibliografía

- Alfonso, L., & Zamora, J. M. (2021). A two-moment machine learning parameterization of the autoconversion process. *Atmospheric Research*, 249, 105269.
<https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2020.105269>
- Beheng, K. D. (2010). The evolution of raindrop spectra: A review of microphysical essentials. In F. Y. . Testik & M. Gebremichael (Eds.), *Rainfall: State of the Science* (pp. 29–48). Wiley Blackwell. <https://doi.org/10.1029/2010GM000957>
- Beheng, K. D., & Doms, G. (1986). A general formulation of collection rates of cloud and raindrops using the kinetic equation and comparison with parameterizations. *Beiträge Zur Phys. Der Atmos*, 59(1), 66–84.
- Benmoshe, N., Pinsky, M., Pokrovsky, A., & Khain, A. (2012). Turbulent effects on the microphysics and initiation of warm rain in deep convective clouds: 2-D simulations by a spectral mixed-phase microphysics cloud model. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 117(6), 6220. <https://doi.org/10.1029/2011JD016603>
- Berry, E. X. (1967). Cloud droplet growth by collection. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 24(6), 688–701. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1967\)024<0688:CDGBC>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1967)024<0688:CDGBC>2.0.CO;2)
- Berry, E. X., & Reinhardt, R. L. (1974a). An analysis of cloud drop growth by collection: Part I. Double distributions. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 31(7), 1814–1824.
[https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1974\)031<1814:AAOCDG>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1974)031<1814:AAOCDG>2.0.CO;2)
- Berry, E. X., & Reinhardt, R. L. (1974b). An analysis of cloud drop growth by collection Part II. Single initial distributions. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 31(7), 1825–1831.
[https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1974\)031<1825:aaocdg>2.0.co;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1974)031<1825:aaocdg>2.0.co;2)
- Bott, A. (1998). A flux method for the numerical solution of the stochastic collection equation. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 55(13), 2284–2293. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1998\)055<2284:AFMFTN>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1998)055<2284:AFMFTN>2.0.CO;2)
- Brenowitz, N. D., & Bretherton, C. S. (2018). Prognostic validation of a neural network unified physics parameterization. *Geophysical Research Letters*, 45(12), 6289–6298.
<https://doi.org/10.1029/2018GL078510>

- Carneiro, J. N. E., Gonçalves, G. F. N., & Mukhopadhyay, A. (2018). Application of the extended quadrature method of moments as a multi-moment parameterization scheme for raindrops sedimentation. *Atmospheric Research*, *213*, 97–109. <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2018.05.023>
- Chen, J.-P., & Liu, S.-T. (2004). Physically based two-moment bulkwater parameterization for warm-cloud microphysics. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *130*(596), 51–78. <https://doi.org/10.1256/qj.03.41>
- Chodes, N., Warner, J., & Gagin, A. (1974). A determination of the condensation coefficient of water from the growth rate of small cloud droplets. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *31*(5), 1351–1357. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1974\)031<1351:ADOTCC>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1974)031<1351:ADOTCC>2.0.CO;2)
- Clark, T. L. (1974). On modelling nucleation and condensation theory in eulerian spatial domain. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *31*(8), 2099–2117. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1974\)031<2099:OMNACT>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1974)031<2099:OMNACT>2.0.CO;2)
- Clark, T. L. (1976). Use of log-normal distributions for numerical calculations of condensation and collection. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *33*(5), 810–821. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1976\)033<0810:UOLNDF>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1976)033<0810:UOLNDF>2.0.CO;2)
- Clark, T. L., & Hall, W. D. (1983). A cloud physical parameterization method using movable basis functions: Stochastic coalescence parcel calculations. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *40*(7), 1709–1728. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1983\)040<1709:ACPPMU>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1983)040<1709:ACPPMU>2.0.CO;2)
- Cohard, J.-M., & Pinty, J.-P. (2000). A comprehensive two-moment warm microphysical bulk scheme. I: Description and tests. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *126*(566), 1815–1842. <https://doi.org/10.1256/smsqj.56613>
- Cotton, W. R., Pielke, R. A., Walko, R. L., Liston, G. E., Tremback, C. J., Jiang, H., McAnelly, R. L., Harrington, J. Y., Nicholls, M. E., Carrio, G. G., & McFadden, J. P. (2003). RAMS 2001: Current status and future directions. *Meteorology and Atmospheric Physics*, *82*(1–4), 5–29. <https://doi.org/10.1007/s00703-001-0584-9>
- Cramér, H. (1999). *Mathematical methods of statistics*. Princeton University Press.

- Dan Foresee, F., & Hagan, M. T. (1997). Gauss-Newton approximation to Bayesian learning. *Proceedings of International Conference on Neural Networks (ICNN'97)*, 3, 1930–1935. <https://doi.org/10.1109/ICNN.1997.614194>
- Dooley, A. L. (2008). *Ice microphysics observations in tropical cyclones from NAMMA*. University of Illinois at Urbana-Champaign.
- Feingold, G., & Levin, Z. (1986). The lognormal fit to raindrop spectra from frontal convective clouds in Israel. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, 25(10), 1346–1363. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1986\)025<1346:TLFTRS>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1986)025<1346:TLFTRS>2.0.CO;2)
- Feingold, G., Tzivion, S., & Leviv, Z. (1988). Evolution of raindrop spectra. Part I: Solution to the stochastic collection/breakup equation using the method of moments. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 45(22), 3387–3399. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1988\)045<3387:EORSPI>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1988)045<3387:EORSPI>2.0.CO;2)
- Feingold, G., Walko, R. L., Stevens, B., & Cotton, W. R. (1998). Simulations of marine stratocumulus using a new microphysical parameterization scheme. *Atmospheric Research*, 47–48, 505–528. [https://doi.org/10.1016/S0169-8095\(98\)00058-1](https://doi.org/10.1016/S0169-8095(98)00058-1)
- Gilmore, M. S., & Straka, J. M. (2008). The Berry and Reinhardt autoconversion parameterization: A digest. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 47(2), 375–396. <https://doi.org/10.1175/2007JAMC1573.1>
- Golovin, A. M. (1963). The solution of the coagulation equation for cloud droplets in a rising air current. *Izk. Akad. Nauk. SSSR. Ser. Geofiz.*, 5, 783–791.
- Grabowski, W. W. (2003). MJO-like coherent structures: Sensitivity simulations using the Cloud-Resolving Convection Parameterization (CRCP). *Journal of the Atmospheric Sciences*, 60(6), 847–864. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(2003\)060<0847:MLCSSS>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(2003)060<0847:MLCSSS>2.0.CO;2)
- Grabowski, W. W. (2006). Indirect impact of atmospheric aerosols in idealized simulations of convective–radiative quasi equilibrium. *Journal of Climate*, 19(18), 4664–4682. <https://doi.org/10.1175/JCLI3857.1>
- Grabowski, W. W., & Smolarkiewicz, P. K. (1999). CRCP: a Cloud Resolving Convection

- Parameterization for modeling the tropical convecting atmosphere. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 133(1–4), 171–178. [https://doi.org/10.1016/S0167-2789\(99\)00104-9](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(99)00104-9)
- Hall, W. D. (1980). A detailed microphysical model within a two-dimensional dynamic framework: Model description and preliminary results. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 37(11), 2486–2507. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1980\)037<2486:ADMMWA>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1980)037<2486:ADMMWA>2.0.CO;2)
- Harrington, J. Y., Sokolowsky, G. A., & Morrison, H. (2021). Semi-analytic functions to calculate the deposition coefficients for ice crystal vapor growth in bin and bulk microphysical models. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 1(aop). <https://doi.org/10.1175/jas-d-20-0307.1>
- Hocking, L. M., & Jonas, P. R. (1970). The collision efficiency of small drops. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 96(410), 722–729. <https://doi.org/10.1002/qj.49709641013>
- Huang, W. T. K. (2014). *Reformulation of the Milbrandt and Yau microphysics parameterization: A triple-moment lognormal scheme*. McGill University.
- Jiang, H., Yu, M., Shen, J., & Xie, M. (2021). Inverse gaussian distributed method of moments for agglomerate coagulation due to brownian motion in the entire size regime. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 173, 1–10. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121229>
- Jung, Y., Xue, M., & Zhang, G. (2010). Simulations of polarimetric radar signatures of a supercell storm using a two-moment bulk microphysics scheme. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 49(1), 146–163. <https://doi.org/10.1175/2009JAMC2178.1>
- Kato, T. (1995). A Box-Lagrangian rain-drop scheme. *Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II*, 73(2), 241–245. https://doi.org/10.2151/jmsj1965.73.2_241
- Kessler, E. (1969). On the distribution and continuity of water substance in atmospheric circulations. In *Meteorological Monographs* (Vol. 10, Issue 32, pp. 1–84). American Meteorological Society. https://doi.org/10.1007/978-1-935704-36-2_1
- Khain, A. P., Beheng, K. D., Heymsfield, A., Korolev, A., Krichak, S. O., Levin, Z., Pinsky, M.,

- Phillips, V., Prabhakaran, T., Teller, A., van den Heever, S. C., & Yano, J.-I. (2015). Representation of microphysical processes in cloud-resolving models: Spectral (bin) microphysics versus bulk parameterization. *Reviews of Geophysics*, *53*(2), 247–322. <https://doi.org/10.1002/2014RG000468>
- Khain, A. P., BenMoshe, N., & Pokrovsky, A. (2008). Factors determining the impact of aerosols on surface precipitation from clouds: An attempt at classification. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *65*(6), 1721–1748. <https://doi.org/10.1175/2007JAS2515.1>
- Khain, A. P., & Lynn, B. (2009). Simulation of a supercell storm in clean and dirty atmosphere using weather research and forecast model with spectral bin microphysics. *Journal of Geophysical Research*, *114*(D19), D19209. <https://doi.org/10.1029/2009JD011827>
- Khain, A. P., Lynn, B., & Dudhia, J. (2010). Aerosol effects on intensity of landfalling hurricanes as seen from simulations with the WRF model with spectral bin microphysics. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *67*(2), 365–384. <https://doi.org/10.1175/2009JAS3210.1>
- Khain, A. P., Ovtchinnikov, M., Pinsky, M., Pokrovsky, A., & Krugliak, H. (2000). Notes on the state-of-the-art numerical modeling of cloud microphysics. *Atmospheric Research*, *55*(3–4), 159–224. [https://doi.org/10.1016/S0169-8095\(00\)00064-8](https://doi.org/10.1016/S0169-8095(00)00064-8)
- Khain, A. P., Phillips, V., Benmoshe, N., & Pokrovsky, A. (2012). The role of small soluble aerosols in the microphysics of deep maritime clouds. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *69*(9), 2787–2807. <https://doi.org/10.1175/2011JAS3649.1>
- Khairoutdinov, M., & Kogan, Y. (2000). A new cloud physics parameterization in a large-eddy simulation model of marine stratocumulus. *Monthly Weather Review*, *128*(1), 229–243. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(2000\)128<0229:ANCPPI>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(2000)128<0229:ANCPPI>2.0.CO;2)
- Korolev, A. V. (1994). A study of bimodal droplet size distributions in stratiform clouds. *Atmospheric Research*, *32*(1–4), 143–170. [https://doi.org/10.1016/0169-8095\(94\)90057-4](https://doi.org/10.1016/0169-8095(94)90057-4)
- Korolev, A. V. (1995). The influence of supersaturation fluctuations on droplet size spectra formation. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *52*(20), 3620–3634. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1995\)052<3620:TIOSFO>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1995)052<3620:TIOSFO>2.0.CO;2)

- Kovetz, A., & Olund, B. (1969). The effect of coalescence and condensation on rain formation in a cloud of finite vertical extent. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 26(5), 1060–1065. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1969\)026<1060:TEOCAC>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1969)026<1060:TEOCAC>2.0.CO;2)
- Li, X., Tao, W.-K., Khain, A. P., Simpson, J., & Johnson, D. E. (2009a). Sensitivity of a cloud-resolving model to bulk and explicit bin microphysical schemes. Part I: Comparisons. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 66(1), 3–21. <https://doi.org/10.1175/2008JAS2646.1>
- Li, X., Tao, W.-K., Khain, A. P., Simpson, J., & Johnson, D. E. (2009b). Sensitivity of a cloud-resolving model to bulk and explicit bin microphysical schemes. Part II: Cloud microphysics and storm dynamics interactions. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 66(1), 22–40. <https://doi.org/10.1175/2008JAS2647.1>
- Lim, K.-S. S., & Hong, S.-Y. (2010). Development of an effective double-moment cloud microphysics scheme with prognostic cloud condensation nuclei (CCN) for weather and climate models. *Monthly Weather Review*, 138(5), 1587–1612. <https://doi.org/10.1175/2009MWR2968.1>
- Lin, Y.-L., Farley, R. D., & Orville, H. D. (1983). Bulk parameterization of the snow field in a cloud model. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, 22(6), 1065–1092. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1983\)022<1065:BPOTSF>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1983)022<1065:BPOTSF>2.0.CO;2)
- Liu, Y., Daum, P. H., & Yum, S. S. (2006). Analytical expression for the relative dispersion of the cloud droplet size distribution. *Geophysical Research Letters*, 33(2), L02810. <https://doi.org/10.1029/2005GL024052>
- Loftus, A. M., & Cotton, W. R. (2014). A triple-moment hail bulk microphysics scheme. Part II: Verification and comparison with two-moment bulk microphysics. *Atmospheric Research*, 150, 97–128. <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2014.07.016>
- Loftus, A. M., Cotton, W. R., & Carrió, G. G. (2014). A triple-moment hail bulk microphysics scheme. Part I: Description and initial evaluation. *Atmospheric Research*, 149, 35–57. <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2014.05.013>
- Long, A. B. (1974). Solutions to the droplet collection equation for polynomial kernels. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 31(4), 1040–1052. <https://doi.org/10.1175/1520->

0469(1974)031<1040:STTDCE>2.0.CO;2

- Low, T. B., & List, R. (1982a). Collision, coalescence and breakup of raindrops. Part I: Experimentally established coalescence efficiencies and fragment size distributions in breakup. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 39(7), 1591–1606.
[https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1982\)039<1591:CCABOR>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1982)039<1591:CCABOR>2.0.CO;2)
- Low, T. B., & List, R. (1982b). Collision, coalescence and breakup of raindrops. Part II: Parameterization of fragment size distributions. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 39(7), 1607–1619. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1982\)039<1607:CCABOR>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1982)039<1607:CCABOR>2.0.CO;2)
- MacKay, D. J. C. (1992). Bayesian interpolation. *Neural Computation*, 4(3), 415–447.
<https://doi.org/10.1162/neco.1992.4.3.415>
- Magaritz, L., Pinsky, M., & Khain, A. (2010). Effects of stratocumulus clouds on aerosols in the maritime boundary layer. *Atmospheric Research*, 97(4), 498–512.
<https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2010.06.010>
- Magaritz, L., Pinsky, M., Knasnov, O., & Khain, A. (2009). Investigation of droplet size distributions and drizzle formation using a new trajectory ensemble model. Part II: Lucky parcels. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 66(4), 781–805.
<https://doi.org/10.1175/2008JAS2789.1>
- Marshall, J. S., & Palmer, W. M. K. (1948). The distribution of raindrops with size. *Journal of Meteorology*, 5(4), 165–166. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1948\)005<0165:TDORWS>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1948)005<0165:TDORWS>2.0.CO;2)
- Milbrandt, J. A., & McTaggart-Cowan, R. (2010). Sedimentation-induced errors in bulk microphysics schemes. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 67(12), 3931–3948.
<https://doi.org/10.1175/2010JAS3541.1>
- Milbrandt, J. A., & Yau, M. K. (2005a). A multimoment bulk microphysics parameterization. Part I: Analysis of the role of the spectral shape parameter. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 62(9), 3051–3064. <https://doi.org/10.1175/JAS3534.1>
- Milbrandt, J. A., & Yau, M. K. (2005b). A multimoment bulk microphysics parameterization. Part II: A proposed three-moment closure and scheme description. *Journal of the*

- Atmospheric Sciences*, 62(9), 3065–3081. <https://doi.org/10.1175/JAS3535.1>
- Milbrandt, J. A., & Yau, M. K. (2006). A multimoment bulk microphysics parameterization. Part III: Control simulation of a hailstorm. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 63(12), 3114–3136. <https://doi.org/10.1175/JAS3816.1>
- Min, Q., Joseph, E., Lin, Y., Min, L., Yin, B., Daum, P. H., Kleinman, L. I., Wang, J., & Lee, Y. N. (2012). Comparison of MODIS cloud microphysical properties with in-situ measurements over the Southeast Pacific. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12(23), 11261–11273. <https://doi.org/10.5194/acp-12-11261-2012>
- Morrison, H. (2012). On the numerical treatment of hydrometeor sedimentation in bulk and hybrid bulk-bin microphysics schemes. *Monthly Weather Review*, 140(5), 1572–1588. <https://doi.org/10.1175/MWR-D-11-00140.1>
- Morrison, H., Thompson, G., & Tatarskii, V. (2009). Impact of cloud microphysics on the development of trailing stratiform precipitation in a simulated squall line: Comparison of one- and two-moment schemes. *Monthly Weather Review*, 137(3), 991–1007. <https://doi.org/10.1175/2008MWR2556.1>
- Ogura, Y., & Takahashi, T. (1973). The development of warm rain in a cumulus model. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 30(2), 262–277. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1973\)030<0262:TOWRI>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1973)030<0262:TOWRI>2.0.CO;2)
- Phillips, V. T. J., Donner, L. J., & Garner, S. T. (2007). Nucleation processes in deep convection simulated by a cloud-system-resolving model with double-moment bulk microphysics. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 64(3), 738–761. <https://doi.org/10.1175/JAS3869.1>
- Phillips, V. T. J., Khain, A. P., Benmoshe, N., & Ilotoviz, E. (2014). Theory of time-dependent freezing. part I: Description of scheme for wet growth of hail. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 71(12), 4527–4557. <https://doi.org/10.1175/JAS-D-13-0375.1>
- Phillips, V. T. J., Khain, A. P., Benmoshe, N., Ilotoviz, E., & Ryzhkov, A. (2015). Theory of time-dependent freezing. Part II: Scheme for freezing raindrops and simulations by a cloud model with spectral bin microphysics. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 72(1), 262–286. <https://doi.org/10.1175/JAS-D-13-0376.1>

- Phillips, V. T. J., Khain, A. P., & Pokrovsky, A. (2007). The influence of time-dependent melting on the dynamics and precipitation production in maritime and continental storm clouds. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *64*(2), 338–359.
<https://doi.org/10.1175/JAS3832.1>
- Pinsky, M., & Khain, A. P. (2002). Effects of in-cloud nucleation and turbulence on droplet spectrum formation in cumulus clouds. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *128*(580), 501–533. <https://doi.org/10.1256/003590002321042072>
- Pinsky, M., Khain, A. P., & Shapiro, M. (2001). Collision efficiency of drops in a wide range of reynolds numbers: Effects of pressure on spectrum evolution. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *58*(7), 742–755. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(2001\)058<0742:ceodia>2.0.co;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(2001)058<0742:ceodia>2.0.co;2)
- Pinsky, M., Magaritz, L., Khain, A., Krasnov, O., & Sterkin, A. (2008). Investigation of droplet size distributions and drizzle formation using a new trajectory ensemble model. Part I: Model description and first results in a nonmixing limit. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *65*(7), 2064–2086. <https://doi.org/10.1175/2007JAS2486.1>
- Prabha, T. V., Khain, A., Maheshkumar, R. S., Pandithurai, G., Kulkarni, J. R., Konwar, M., & Goswami, B. N. (2011). Microphysics of premonsoon and monsoon clouds as seen from in situ measurements during the Cloud Aerosol Interaction And Precipitation Enhancement Experiment (CAIPEEX). *Journal of the Atmospheric Sciences*, *68*(9), 1882–1901.
<https://doi.org/10.1175/2011JAS3707.1>
- Pruppacher, H. R., & Klett, J. D. (2010). Microphysics of clouds and precipitation. In *Microphysics of Clouds and Precipitation* (2nd ed., Vol. 18). Springer Netherlands.
<https://doi.org/10.1007/978-0-306-48100-0>
- Rasp, S., Pritchard, M. S., & Gentine, P. (2018). Deep learning to represent subgrid processes in climate models. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *115*(39), 9684–9689.
<https://doi.org/10.1073/pnas.1810286115>
- Reisner, J., Rasmussen, R. M., & Bruintjes, R. T. (1998). Explicit forecasting of supercooled liquid water in winter storms using the MM5 mesoscale model. *Quarterly Journal of the*

- Royal Meteorological Society*, 124(548), 1071–1107.
<https://doi.org/10.1002/qj.49712454804>
- Rodríguez-Genó, C. F., & Alfonso, L. (2021a). Parameterization of the collision-coalescence process using series of basis functions : COLNETv1 . 0 . 0 model development using a machine learning approach (Preprint). *Geoscientific Model Development*, May, 1–27.
<https://doi.org/10.5194/gmd-2021-125>
- Rodríguez-Genó, C. F., & Alfonso, L. (2021b). Sedimentation calculations within an Eulerian framework using series of basis functions. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 147(736), 2053–2066. <https://doi.org/10.1002/qj.4009>
- Saleeby, S. M., & Cotton, W. R. (2004). A large-droplet mode and prognostic number concentration of cloud droplets in the Colorado State University Regional Atmospheric Modeling System (RAMS). Part I: Module descriptions and supercell test simulations. *Journal of Applied Meteorology*, 43(1), 182–195. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(2004\)043<0182:ALMAPN>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(2004)043<0182:ALMAPN>2.0.CO;2)
- Sanders, W. S. (2018). *Machine Learning techniques for weather forecasting* [The University of Georgia]. https://getd.libs.uga.edu/pdfs/sanders_william_s_201712_ms.pdf
- Sant, V., Lohmann, U., & Seifert, A. (2013). Performance of a triclass parameterization for the collision-coalescence process in shallow clouds. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 70(6), 1744–1767. <https://doi.org/10.1175/JAS-D-12-0154.1>
- Schoenberg Ferrier, B. (1994). A double-moment multiple-phase four-class bulk ice scheme. Part I: Description. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 51(2), 249–280.
[https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1994\)051<0249:ADMMPF>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1994)051<0249:ADMMPF>2.0.CO;2)
- Seifert, A., & Beheng, K. D. (2001). A double-moment parameterization for simulating autoconversion, accretion and selfcollection. *Atmospheric Research*, 59–60, 265–281.
[https://doi.org/10.1016/S0169-8095\(01\)00126-0](https://doi.org/10.1016/S0169-8095(01)00126-0)
- Seifert, A., & Rasp, S. (2020). Potential and limitations of Machine Learning for modeling warm-rain cloud microphysical processes. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 12(12). <https://doi.org/10.1029/2020MS002301>

- Shen, J., Yu, M., & Lin, J. (2020). Description of atmospheric aerosol dynamics using an inverse Gaussian distributed method of moments. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 77(9), 3011–3031. <https://doi.org/10.1175/JAS-D-20-0077.1>
- Sobhani, N., Loft, R., Gettelman, A., Chen, C. C., & Gagne, D. J., I. (2018). Using Machine Learning to emulate critical cloud microphysical processes. *American Geophysical Union, Fall Meeting 2018*, IN13C-0686. <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2018AGUFMIN13C0686S>
- Straka, J. M. (2009). *Cloud and precipitation microphysics* (Vol. 9780521883). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511581168>
- Tampieri, F., & Tomasi, C. (1976). Size distribution models of fog and cloud droplets in terms of the modified gamma function. *Tellus*, 28(4), 333–347. <https://doi.org/10.3402/tellusa.v28i4.10300>
- Tao, F., Zhang, Z., Liu, J., & Yokozawa, M. (2009). Modelling the impacts of weather and climate variability on crop productivity over a large area: A new super-ensemble-based probabilistic projection. *Agricultural and Forest Meteorology*, 149(8), 1266–1278. <https://doi.org/10.1016/j.agrformet.2009.02.015>
- Tao, W.-K., Simpson, J., & McCumber, M. (1989). An ice-water saturation adjustment. *Monthly Weather Review*, 117(1), 231–235. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(1989\)117<0231:AIWSA>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(1989)117<0231:AIWSA>2.0.CO;2)
- Tao, W. K., Chen, J., Li, Z., Wang, C., & Zhang, C. (2012). Impact of aerosols on convective clouds and precipitation. *Reviews of Geophysics*, 50(2). <https://doi.org/10.1029/2011RG000369>
- Tao, W., & Moncrieff, M. W. (2009). Multiscale cloud system modeling. *Reviews of Geophysics*, 47(4), RG4002. <https://doi.org/10.1029/2008RG000276>
- Teller, A., & Levin, Z. (2008). Factorial method as a tool for estimating the relative contribution to precipitation of cloud microphysical processes and environmental conditions: Method and application. *Journal of Geophysical Research*, 113(D2), D02202. <https://doi.org/10.1029/2007JD008960>

- Thompson, G., Field, P. R., Rasmussen, R. M., & Hall, W. D. (2008). Explicit forecasts of winter precipitation using an improved bulk microphysics scheme. Part II: Implementation of a new snow parameterization. *Monthly Weather Review*, *136*(12), 5095–5115. <https://doi.org/10.1175/2008MWR2387.1>
- Thompson, G., Rasmussen, R. M., & Manning, K. (2004). Explicit forecasts of winter precipitation using an improved bulk microphysics scheme. Part I: Description and sensitivity analysis. *Monthly Weather Review*, *132*(2), 519–542. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(2004\)132<0519:EFOWPU>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(2004)132<0519:EFOWPU>2.0.CO;2)
- Thompson, P. D. (1968). A transformation of stochastic equation for droplet coalescence. *Bulletin of the American Meteorological Society*, *49*(5), 596.
- Tzivion, S., Feingold, G., & Levin, Z. (1987). An efficient numerical solution to the stochastic collection equation. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *44*(21), 3139–3149. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1987\)044<3139:AENSTT>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1987)044<3139:AENSTT>2.0.CO;2)
- Wacker, U., & Lüpkes, C. (2008). On the selection of prognostic moments in parametrization schemes for drop sedimentation. *Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography*, *61*(4), 498–511. <https://doi.org/10.1111/j.1600-0870.2009.00405.x>
- Wang, L. P., Ayala, O., & Grabowski, W. W. (2005). Improved formulations of the superposition method. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *62*(4), 1255–1266. <https://doi.org/10.1175/JAS3397.1>
- Wood, R., & Blossey, P. N. (2005). Comments on “Parameterization of the autoconversion process. Part I: Analytical formulation of the Kessler-type parameterizations.” *Journal of the Atmospheric Sciences*, *62*(8), 3003–3006. <https://doi.org/10.1175/JAS3524.1>
- Yin, Y., Levin, Z., Reisin, T., & Tzivion, S. (2000). Seeding convective clouds with hygroscopic flares: Numerical simulations using a cloud model with detailed microphysics. *Journal of Applied Meteorology*, *39*(9), 1460–1472. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(2000\)039<1460:SCCWHF>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(2000)039<1460:SCCWHF>2.0.CO;2)
- Zhou, Y. P., Tao, W.-K., Hou, A. Y., Olson, W. S., Shie, C.-L., Lau, K.-M., Chou, M.-D., Lin, X., & Grecu, M. (2007). Use of high-resolution satellite observations to evaluate cloud and

precipitation statistics from cloud-resolving model simulations. Part I: South china sea monsoon experiment. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 64(12), 4309–4329.
<https://doi.org/10.1175/2007JAS2281.1>

Ziemer, C., Jasor, G., Wacker, U., Beheng, K. D., & Polifke, W. (2014). Quantitative comparison of presumed-number-density and quadrature moment methods for the parameterisation of drop sedimentation. *Meteorologische Zeitschrift*, 23(4), 411–423.
<https://doi.org/10.1127/0941-2948/2014/0564>

Ziemer, C., & Wacker, U. (2014). A comparative study of B-, Γ - and log-normal distributions in a three-moment parameterization for drop sedimentation. *Atmosphere*, 5(3), 484–517.
<https://doi.org/10.3390/atmos5030484>