

MÉTODOS MATEMÁTICOS PARA RESOLVER UMA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO DE MASSA EM SUPERFÍCIE ESFÉRICA

Emanuel Pinto Sampaio¹, Iury Angelo Gonçalves²

Ciências Exatas e da Terra

Introdução e Objetivo

A atmosfera é uma fina camada composta de vários gases que envolve a Terra, sendo essencial para o desenvolvimento e funcionamento ordenado dos processos físicos e biológicos. Dentre os diversos gases que estão na atmosfera, o gás dióxido de carbono (CO_2) é um dos mais importantes, pois sua emissão em massa contribui para a retenção de calor na troposfera e consequentemente pode modificar o sistema terrestre (Arya, 2001).

Em mares agitados, gotículas espuma (*spume droplets*) surgem do cisalhamento das cristas das ondas (Figura 1) (Andreas, 1989), sendo ejetadas na atmosfera, onde absorvem gás por difusão antes de retornar ao oceano, transportando assim CO_2 entre atmosfera e oceano (Gonçalves, 2014). Este subprojeto de pesquisa de Iniciação Científica tem como objetivo avaliar os efeitos das variações do raio e da temperatura da gotícula na equação de difusão do gás CO_2 , que ocorre através da superfície de gotículas de espuma (gotículas esféricas), geradas pelo cisalhamento da crista de ondas oceânicas. O estudo busca aprimorar a compreensão desse processo em diferentes condições físicas e avaliar o impacto de simplificações, como assumir raio e temperatura constantes.

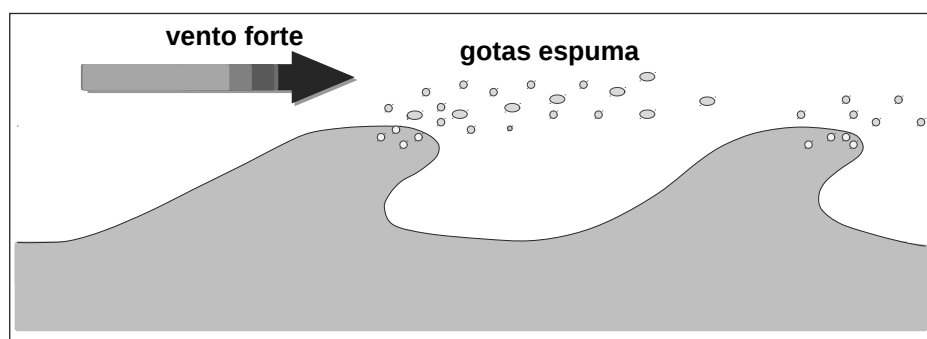


Figura 1 – Geração de gotículas espumas.

Fonte: Adaptada de Andreas & DeCosmo 2002.

¹Graduando em Matemática Industrial, Universidade Federal do Espírito Santo - UFES,
emanuel.sampaio@edu.ufes.br;

²Doutor em Meteorologia (INPE), Professor Adjunto, Departamento de Matemática Aplicada – CEUNES/UFES,
iury.goncalves@ufes.br.

Método e Metodologia

Etapa 1. Microfísica de gotículas

Quando as gotículas são lançadas na atmosfera, devido à diferença de temperatura e umidade entre o oceano e a atmosfera, elas podem evaporar gerando variações na temperatura e no raio e, consequentemente, em sua área de superfície. Desse modo, tais fatores serão considerados na modelagem da difusão de gás em sua superfície.

Para computar a evolução temporal do raio $r(t)$ e da temperatura (T) de uma gotícula esférica, durante sua fase de vida, será utilizada a formulação proposta por Andreas (1989; 2005),

$$\frac{r(t) - r_{eq}}{(r_i - r_{eq})} = \exp\left(\frac{-t}{\tau_r}\right) \quad (1) \quad , \quad \frac{T(t) - T_{eq}}{(T_i - T_{eq})} = \exp\left(\frac{-t}{\tau_T}\right) \quad (2)$$

em que τ_r e τ_T , *e-folding time*, são os tempos necessários para reduzir o lado direito dessas equações para $1/e$; $r_i = r(t = 0)$, $r_{eq} = r(t \mapsto \infty)$ são os raios inicial e de equilíbrio, respectivamente; T_i e $T_{eq} = r(t \mapsto \infty)$ são as temperaturas inicial e de equilíbrio da gotícula.

A gotícula ajusta-se rapidamente ao ambiente, atingindo equilíbrio térmico antes de mudanças significativas no raio (Andreas, 2005). Assim, a evolução ocorre sob a temperatura de equilíbrio T_{eq} . Dentro dessa hierarquia temporal, analisam-se sucessivamente os parâmetros: tempo de vida (τ_f), tempo de decaimento da temperatura (τ_T), temperatura de equilíbrio (T_{eq}), raio de equilíbrio (r_{eq}) e tempo de decaimento do raio (τ_r). O tempo de vida τ_f é obtido a partir de Gonçalves & Innocentini (2018, [Eq.(13)]) e Andreas (1989, [Eq.(81)]). Já τ_T e T_{eq} são derivados de Andreas (2005) [Eqs. (4.11) e (3.1)], enquanto r_{eq} é descrito em Pruppacher & Klett (1978) [Eqs. (13)–(28)], aplicado em Innocentini & Gonçalves (2010) [Eq. (3.8)] e Andreas (2005) [Eq. (2.1)]. Para τ_r , segue-se a formulação de Andreas (2005) [Eq. (6.7)], baseada no comportamento aproximadamente linear da função $H(t)$ para $t/\tau_r \leq 1$, com a estimativa prática obtida por expansão em série de Taylor. Os cálculos correspondentes são resolvidos pelo método iterativo de Newton.

Etapa 2. Modelo de difusão de gás em superfícies esféricas

Neste trabalho, considera-se o modelo de difusão de gás em superfícies esféricas proposto por Pruppacher & Klett, 1978, [Eq. (17–126)], aplicado à transferência de CO_2 para o interior de uma gotícula esférica de água com circulação interna. A evolução da massa de gás CO_2 , $m(t)$, no interior da gotícula, é descrita por:

$$\frac{dm}{dt} = 4 \pi r(t) D_g^* \left(C_{ar} - \frac{3m(t)}{4 \pi r^3(t) H^* R T(t)} \right), \quad (3)$$

em que $r(t)$ é o raio da gotícula, D_g o coeficiente de difusão molecular de CO_2 corrigido pela curvatura (Gonçalves & Innocentini, 2018, [Eq. (15)]), e C_{ar} e $C(t) = m(t)/V = \frac{3m(t)}{4\pi r^3}$ as concentrações de CO_2 no ar e no interior da gota. Os parâmetros H , R e $T(t)$ correspondem, respectivamente, à constante da lei de Henry ajustada (Gonçalves & Innocentini, 2018, [Eq. (3)]), à constante universal dos gases ($0.082 \text{ atm L mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$) e à temperatura da gotícula em t .

Etapa 3. Solução numérica da difusão de gás

Para computar a massa de gás na gotícula $m(t)$, as Eqs. (1), (2) e (3) devem ser resolvidas simultaneamente. Note que as Eqs. (1) e (2) admitem soluções analíticas, de modo que os valores de $r(t)$ e $T(t)$ podem ser calculados diretamente a cada instante. A Eq. (3), que descreve a taxa de variação da massa $m(t)$, é então resolvida numericamente pelo método de Euler Backward, que consiste em discretizar o tempo e aproximar a derivada dm/dt no instante futuro t_{n+1} . O intervalo $[0, \tau_f]$, correspondente ao tempo de residência da gotícula na atmosfera, é dividido em N subintervalos de tamanho Δt , gerando as aproximações $m_n \approx m(t_n)$ em cada passo temporal, permitindo assim calcular a massa final de CO_2 $m(\tau_f)$. Aplicando a fórmula de diferenças finitas do método de Euler Backward à equação da massa (Eq. (3)), obtém-se:

$$\left. \frac{dm}{dt} \right|_{t=t_{n+1}} \approx \frac{m_{n+1} - m_n}{\Delta t} \implies m_{n+1} = \frac{m_n + \Delta t \frac{4\pi r_{n+1} D_g^* C_{ar}}{3\Delta t D_g^*}}{1 + \frac{r_{n+1}^2 H^* R T_{n+1}}{3\Delta t D_g^*}}. \quad (4)$$

O algoritmo computacional para a evolução temporal da massa é, portanto, descrito como:

Algorithm 1: Solução numérica da difusão de gás em gotículas esféricas

Input: $\Delta t, \tau_f, m_0, r_i, r_{eq}, T_i, T_{eq}, \tau_r, \tau_T, S, T_{ar}, R, C_{ar}$

Output: m_n para $n = 0, 1, \dots, N$

```

1  $N \leftarrow \left\lfloor \frac{\tau_f}{\Delta t} \right\rfloor$ ;
2  $m_0 \leftarrow$  massa inicial da gotícula;
3 for  $n \leftarrow 0$  to  $N - 1$  do
4    $t_{n+1} \leftarrow (n + 1) \Delta t$ ;
5    $r_{n+1} \leftarrow r_{eq} + (r_i - r_{eq}) \exp\left(-\frac{t_{n+1}}{\tau_r}\right)$ ;
6    $T_{n+1} \leftarrow T_{eq} + (T_i - T_{eq}) \exp\left(-\frac{t_{n+1}}{\tau_T}\right)$ ;
7    $H_{n+1}^* \leftarrow f_H(T_{n+1}, S)$ ;
8    $D_g^* \leftarrow f_D(r_{n+1}, T_{ar}, R)$ ;
9    $m_{n+1} \leftarrow \frac{m_n + \Delta t \frac{4\pi r_{n+1} D_g^* C_{ar}}{3\Delta t D_g^*}}{1 + \frac{r_{n+1}^2 H_{n+1}^* R T_{n+1}}{3\Delta t D_g^*}}$ ;

```

Etapa 4. Elaboração de rotinas computacionais e experimentos

As simulações tiveram como objetivo avaliar os efeitos da variação temporal do raio $r(t)$ e da temperatura $T(t)$ na absorção de CO_2 pelas gotículas, considerando raios iniciais de 30, 100, 250 e 500 μm e altura significativa da onda de 6 m. Foram realizados quatro experimentos: **E-CONTROL** ($T(t)$ e $r(t)$ constantes); **E-R** (variação apenas de $r(t)$); **E-T** (variação apenas de $T(t)$); **E-RT** (variação simultânea de $T(t)$ e $r(t)$).

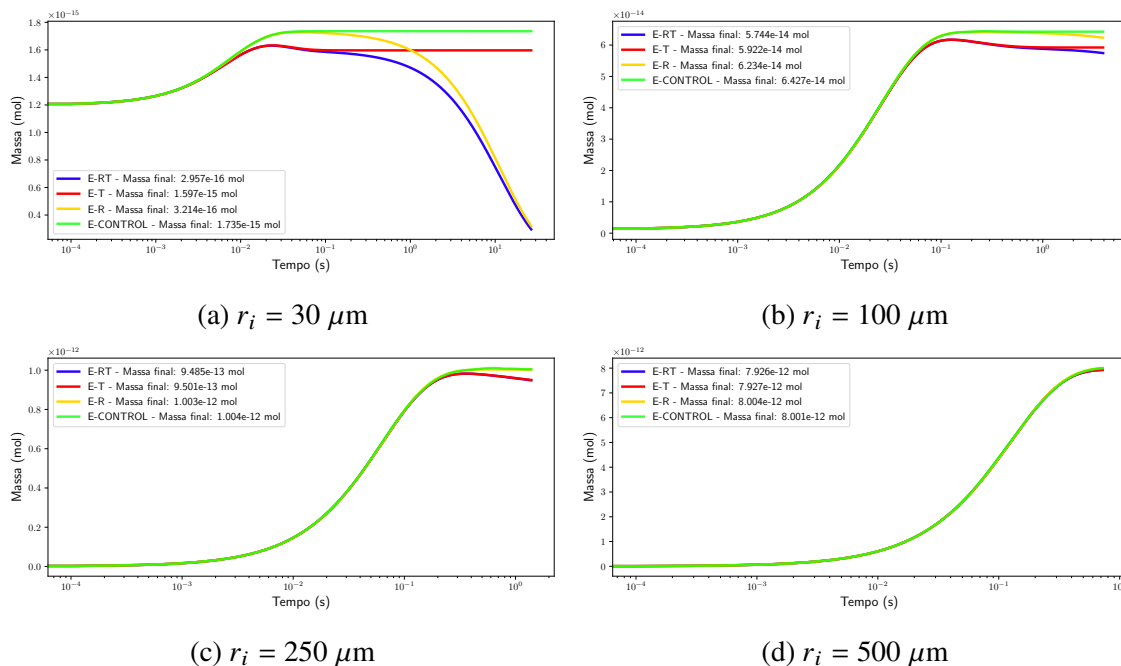


Figura 2 – Simulações para diferentes valores de raio inicial (r_i) com $H_s = 6$ m

Fonte: Produção do próprio autor

Discussão e Resultados

As simulações com ondas de grande amplitude ($H_s = 6$ m) permitiram examinar de forma detalhada como o tempo de vida atmosférico das gotículas afeta a absorção de CO_2 . Nessa análise, foram considerados diferentes raios iniciais e a evolução temporal de $r(t)$ e $T(t)$ conforme os quatro experimentos previamente definidos (**E-CONTROL**, **E-R**, **E-T** e **E-RT**).

Gotas pequenas ($r_i = 30 \mu\text{m}$) mostraram alta sensibilidade às variações microfísicas, com a absorção de CO_2 no cenário E-RT até 83% menor que no E-CONTROL. Para tamanhos intermediários ($r_i = 100$ e $250 \mu\text{m}$), os efeitos foram gradualmente reduzidos, com quedas de 10,6% e 5,5%, respectivamente. Em gotas grandes ($r_i = 500 \mu\text{m}$), as diferenças ficaram abaixo de 1%, mostrando que a influência das variações de $r(t)$ e $T(t)$ é desprezível em maiores raios.

Considerações Finais

Conclui-se que o impacto das variações de $r(t)$ e $T(t)$ na absorção de CO_2 diminui com o aumento do raio inicial da gotícula, sendo mais relevante para gotas pequenas, especialmente em condições de ondas intensas. Para gotas maiores, essas variações tornam-se quase irrelevantes, mostrando que o efeito dos fatores microfísicos se reduz com o tamanho. Dessa forma, essas variações exercem papel significativo na solução da equação de difusão de gás (Eq. 3), influenciando diretamente a absorção de CO_2 por gotículas suspensas na atmosfera.

Agradecimentos/Apoio Técnico

Agradeço ao Prof. Iury Angelo Gonçalves pela orientação e incentivo durante o desenvolvimento deste trabalho de Iniciação Científica e à UFES pelo apoio financeiro por meio da bolsa de IC.

Referências

- Andreas, E. L. (1989). Thermal and size evolution of sea spray droplets. U.S. Army Cold Regions Research and Engineering Laboratory, CRREL-Report 89-11.
- Andreas, E. L. (2005). Approximation formulas for the microphysical properties of saline droplets. *Atmospheric Research*, 75, 323–345.
- Andreas, E. L. & DeCosmo, J. (2002). The signature of sea spray in the hexos turbulent heat flux data. *Boundary Layer Meteorology*, 103, 303–333.
- Arya, S. P. (2001). *Introduction to micrometeorology*. Flórida: Academic Press.
- Gonçalves, I. A. (2014). *Parametrizações dos efeitos da quebra de ondas oceânicas e gotículas na modelagem numérica de processos de trocas de CO_2 , momentum e calor na interface oceano-atmosfera*. PhD thesis, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos.
- Gonçalves, I. A. & Innocentini, V. (2018). Analytical quantification of carbon dioxide exchange mediated by spume droplets. *Boundary-Layer Meteorology*, 169(2), 327–345.
- Innocentini, V. & Gonçalves, I. A. (2010). The impact of spume droplets and wave stress parameterizations on simulated near-surface maritime wind and temperature. *Journal of physical oceanography*, 40(6), 1373–1389.
- Pruppacher, H. R. & Klett, J. D. (1978). *Microphysics of Cloud and Precipitation*. Londres: D. Reidel Publishing Company.