

ANEXO A
SISTEMA DE MODELIZACIÓN DE LA CALIDAD
DEL AIRE: WRF-ARW/ CMAQ





ÍNDICE

A.1 INTRODUCCIÓN	5
A.2 MODELO METEOROLÓGICO MESOSCALAR WRF-ARW.....	7
A.3 MODELO DE TRANSPORTE QUÍMICO: CMAQ	11
A.4 INFRAESTRUCTURA COMPUTACIONAL	13



A.1 INTRODUCCIÓN

En el presente anexo se define el sistema de modelización de la calidad del aire empleado para la realización de este estudio. En este anexo se describen los módulos meteorológico (WRF-ARW) y de transporte químico (CMAQ), así como la herramienta computacional empleada (MareNostrum). Adicionalmente, se definen las parametrizaciones empleadas para llevar a cabo la simulación de la calidad del aire así como las características de los dominios de trabajo. Las emisiones acopladas, estimadas por el módulo de emisiones HERMES, se describen en el Anexo V de la presente memoria.



A.2 MODELO METEOROLÓGICO MESOSCALAR WRF-ARW

El modelo meteorológico mesoscalar no-hidrostático WRF (figura 2.1) representa el resultado de un proyecto ambicioso planteado por el National Center of Atmospheric Research (NCAR), y el National Centers for Environmental Prediction (NCEP) de Estados Unidos, entre otros organismos, con el objetivo de desarrollar un modelo mesoscalar de última generación que incorpore los últimos avances en la materia. Para ello cuenta con la experiencia adquirida con el modelo meteorológico MM5 de la Pennsylvania State University y el modelo Eta del NCEP, el primero orientado a estudios científicos y el segundo a operaciones de predicción del tiempo.

WRF comenzó su desarrollo en el año 2000 y actualmente dispone de un gran número de opciones, que incluyen la capacidad de trabajar con anidamientos múltiples, la opción de ser empleado como modelo hidrostático o no-hidrostático, posee la capacidad de asimilar datos de observaciones meteorológicas, e incorpora los últimos avances en parametrizaciones físicas. El sistema se ha implementado en numerosas plataformas informáticas y se ha reestructurado para su mejor aplicación. Actualmente se considera el modelo que incorpora los últimos avances en modelización mesoscalar con todo el estado del conocimiento en este campo, siendo un modelo de referencia a nivel mundial.

Los modelos de mesoescala de área limitada necesitan de información meteorológica para la inicialización y las condiciones de contorno durante la simulación. Esta información proviene de modelos meteorológicos globales (en este caso, reanálisis del modelo meteorológico global del NCEP cada 6 horas).

WRF y CMAQ permiten trabajar con distintas proyecciones, pero se recomienda para latitudes medias la proyección Lambert, que es la que se ha escogido. Con todo ello, se han definido cuatro dominios meteorológicos de trabajo que abarcan el oeste de Europa con una resolución baja, hasta Cataluña con elevada resolución. En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** y en las Tablas 2.1 y 2.2 se presentan la definición de los cuatro dominios de anidamiento progresivo.



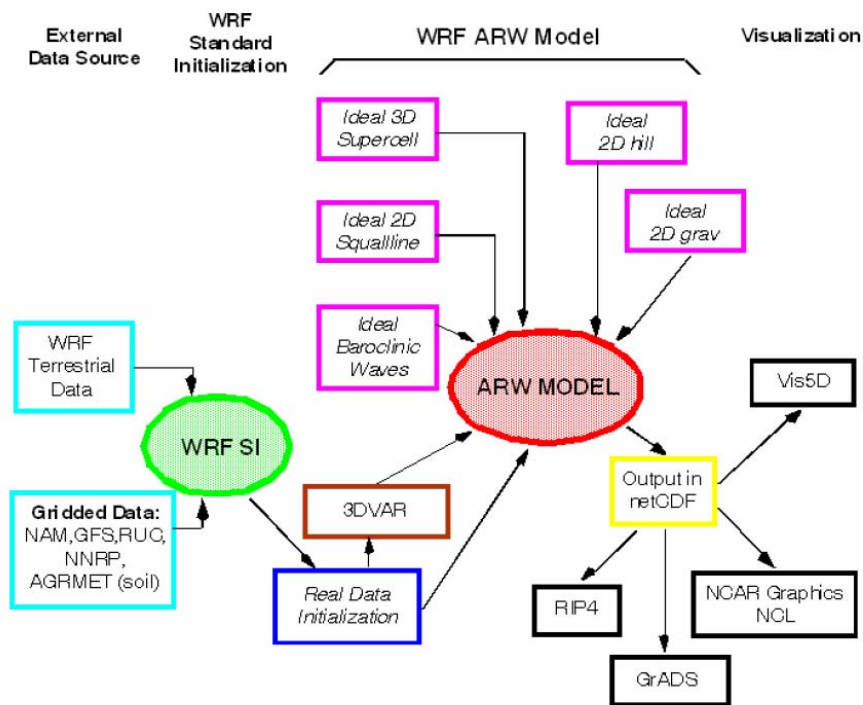


Figura 0.1. Sistema de modelización meteorológica mesoscalar WRF

El dominio más externo (D1) cubre parte de Europa y norte de África con un tamaño de malla de 27 km, el segundo dominio (D2) engloba toda la península Ibérica y sur de Francia a 9 km de resolución. El tercer dominio (D3) engloba un cuadrante de la Península Ibérica con una resolución de 3 km para la zona de. Y el cuarto dominio (D4) se centra en Barcelona con una resolución de 1 km². Para las simulaciones de estudio se ha configurado el modelo con 33 niveles verticales (tabla 2.3), con 12 capas dentro de la capa fronteriza para tenerla definida con mayor detalle dentro de la troposfera.

La interacción entre dominios se ha configurado para que sea en dos direcciones (two way nesting), es decir, el dominio externo transfiere las condiciones de frontera al dominio interno, con retroalimentación del dominio interno al externo.



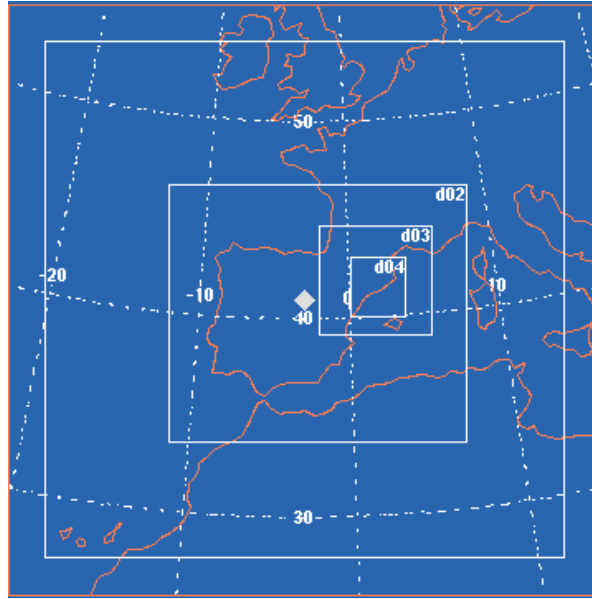


Figura 0.2. Definición de los dominios de trabajo para Barcelona

Dominio	Nº celdas dir. x	Nº celdas dir. y	Resolución hor. (km)	Intervalo de integración (s)
D1	143	141	27	144
D2	190	130	9	48
D3	217	220	3	16
D4	337	322	1	4
Latitud central Dominio externo	central Dominio		42.0°N	
Longitud central Dominio externo	central Dominio		2.7°W	

Tabla 0.1 Parámetros de definición de los dominios de trabajo para Cataluña

Nº capa	Nivel σ	Altura (m snt*)	Nº capa	Nivel σ	Altura (m snt)
33	1	0	16	0.639	3219
32	0.995	38	15	0.596	3689
31	0.990	77	14	0.550	4216
30	0.985	115	13	0.501	4806



29	0.980	171	12	0.451	5464
28	0.966	267	11	0.398	6198
27	0.950	390	10	0.345	7013
26	0.933	529	9	0.290	7918
25	0.913	686	8	0.236	8891
24	0.892	860	7	0.188	9883
23	0.869	1052	6	0.145	10871
22	0.844	1267	5	0.108	11858
21	0.816	1509	4	0.075	12866
20	0.786	1780	3	0.046	13913
19	0.753	2083	2	0.021	14992
18	0.718	2420	1	0.0	15781
17	0.680	2798			

Tabla 0.2 Altura de los 33 niveles verticales del modelo meteorológico

*snt: sobre el nivel del terreno



A.3 MODELO DE TRANSPORTE QUÍMICO: CMAQ

La elección de un modelo de transporte químico (CTM) para ser aplicado en las áreas de estudio debe considerar hipótesis bastante estrictas, puesto que el área de estudio tiene una alta complejidad topográfica y meteorológica. La elección del modelo viene condicionada, además de por el dominio de estudio, por la extensión de uso del CTM y el soporte y la documentación disponible. Otro punto a considerar es la disponibilidad de modelos de código abierto. Igualmente, el modelo debe ser multiescala, permitiendo la realización de anidamientos y que esté suficientemente documentado y soportado. El sistema de transporte químico CMAQ (Community Multiscale Air Quality Modelling System) (EPA, Estados Unidos), además de cumplir estos requisitos, permite simular química en fase gas y heterogénea, aerosoles con química acuosa de forma modular y analizar la química en nubes de forma detallada (figura 3.1). Los esquemas tipo CBM-IV que se utilizan para su análisis incluyen extensiones con química acuosa y aerosoles. CMAQ representa el estado más avanzado actual de los conocimientos en la modelización de calidad del aire.

Los dominios de estudio del modelo de transporte químico, así como su resolución, coinciden con los dominios definidos en las Tablas 3.1 y 3.2 para el modelo meteorológico. Las simulaciones se han inicializado con una simulación a nivel peninsular (dominio D2) para establecer con detalle las condiciones iniciales y de contorno del dominio de estudio.

Se ha de tener en cuenta que el dominio D4, aunque está centrado en Barcelona, no abarca exclusivamente la zona metropolitana. En la atmósfera se dan reacciones químicas y procesos de transporte y dispersión de contaminantes, lo que supone que, en ocasiones, los efectos de la emisión de determinados contaminantes no se produzcan en zonas próximas al punto de emisión, sino a sotavento, especialmente en el caso de la contaminación fotoquímica.



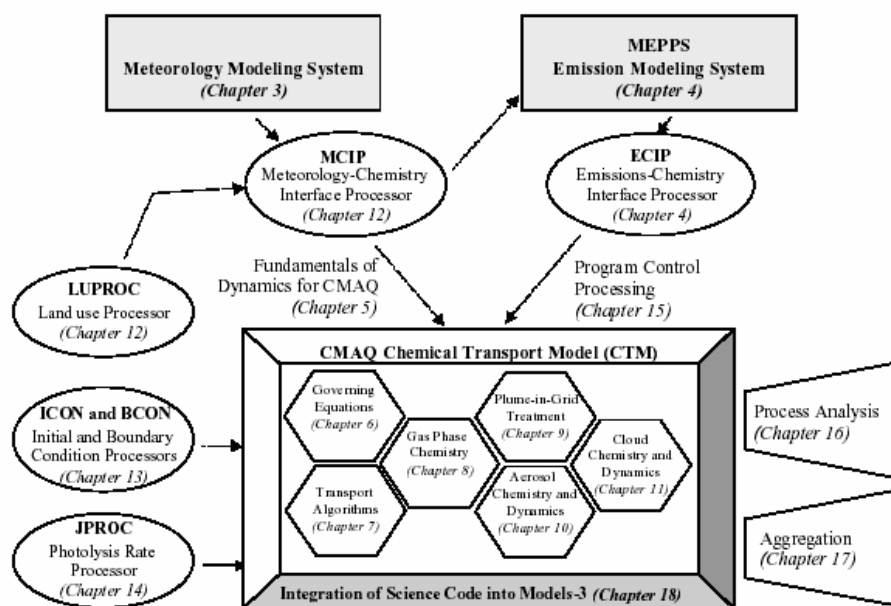


Figura 4.1. Estructura del modelo de calidad del aire CMAQ



A.4 INFRAESTRUCTURA COMPUTACIONAL

Uno de los puntos débiles de los modelos de tercera generación de calidad del aire es su elevado coste computacional. De ahí que para la realización de las simulaciones de calidad del aire, se cuenta con la infraestructura del supercomputador MareNostrum ubicado en el Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS). Fundado en 2005, ha heredado toda la experiencia de diversos grupos de investigación en supercomputación como el CEPBA (Centro Europeo de Paralelismo de Barcelona) o en modelización ambiental como el LMA (Laboratorio de Modelización Ambiental), y se ha visto incrementado con la incorporación de MareNostrum, el tercero supercomputador más potente de Europa, y treceavo del mundo, de acuerdo con la lista top500 de noviembre de 2007.

Sus características son:

- MareNostrum: supercomputador basado en procesadores PowerPC, arquitectura BladeCenter, sistema operativo abierto Linux 2.6 cluster (SUSE), y red de interconexión Myrinet.
- 94,21 Teraflops de rendimiento de pico teórico (94,21 billones ($94,21 \times 10^{12}$) de operaciones por segundo).
- 10240 IBM Power PC 970MP procesadores a 2.3 GHz
- 20 TB Main Memory (4GB ECC 333 DDR por nodo).
- 280 + 90 TB de almacenamiento.
- 3 redes de interconexión:
 - ✓ Myrinet
 - ✓ Gigabit Ethernet
 - ✓ Ethernet



Figura 5.1. Supercomputador Mare Nostrum



