

# *Charla 13: Modelos Numéricos para el Pronosticado de la Calidad del Aire*

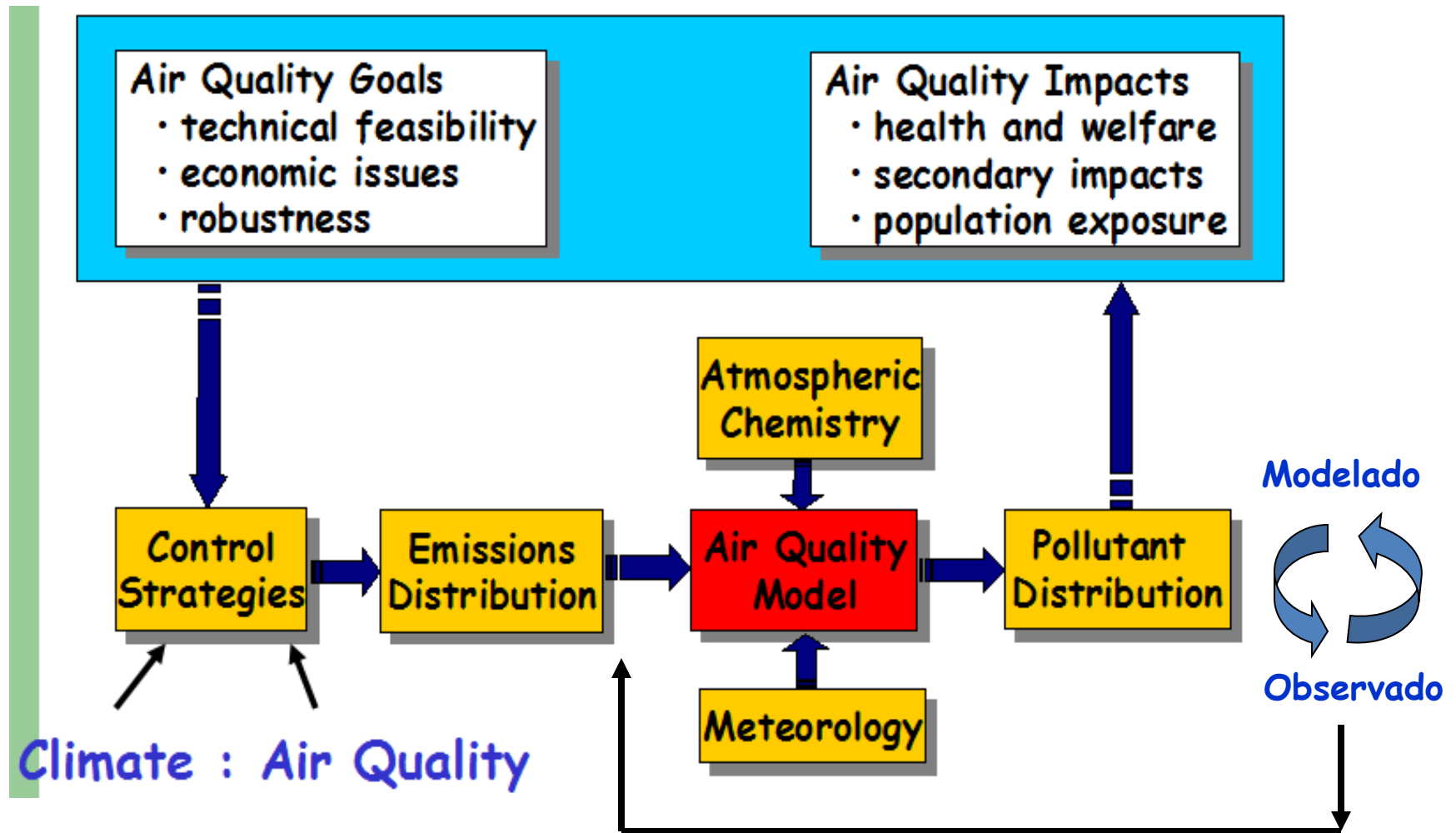
**Taller Centroamericano de  
Pronosticado de la Calidad del Aire**

San José, Costa Rica

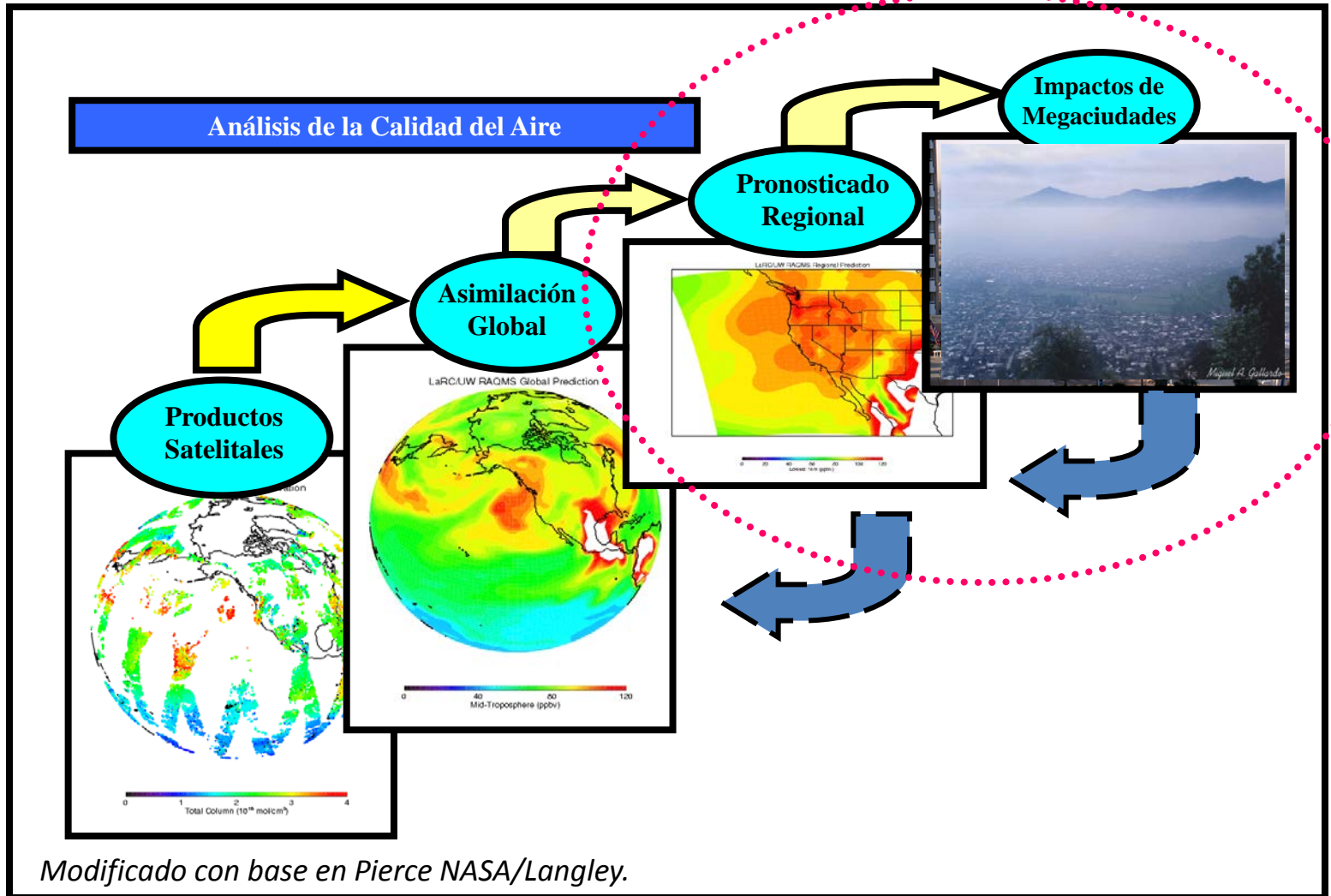
17-21 de Octubre del 2011



# Los Modelos Juegan un Papel Clave al Vincular las Emisiones a la Distribución de Aerosoles y Oligogases y los Efectos Posteriores



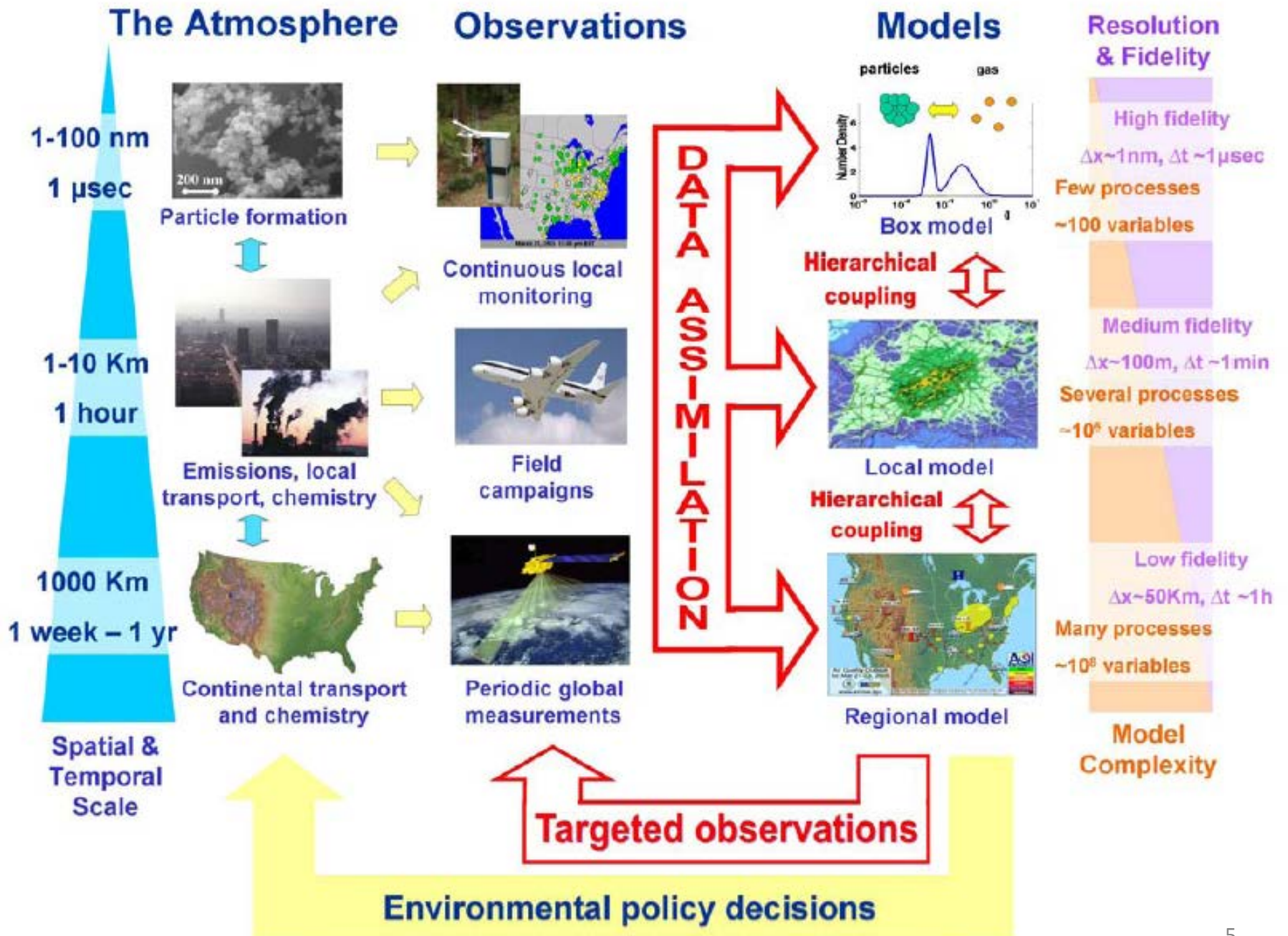
# Pronosticando la Calidad del Aire: Un Reto de Escalas e Integración



*Modificado con base en Pierce NASA/Langley.*

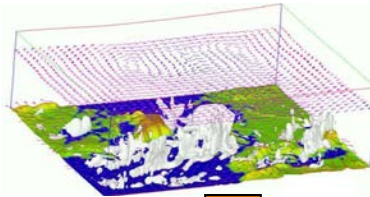
# Los Modelos Son un Componente Integro de los Estudios sobre la Calidad del Aire

- Para planificar experimentos en el campo.
- Expresan los datos observados en un contexto 4D.
- Facilitan la integración de las diferentes plataformas de medición.
- Permiten la evaluación de procesos (p.ej., impacto de la quema de biomasa, química heterogénea).
- Permiten evaluar estimaciones de emisiones (tanto abajo-arriba como arriba-abajo).
- Para probar estrategias de control de emisiones.
- Pronosticado de la calidad del aire.
- Selección de sitios de medición.

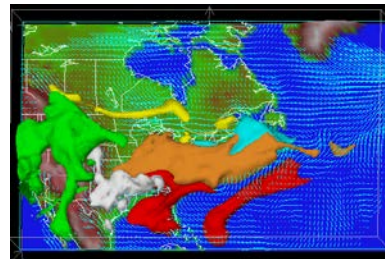


# Modelación de la Calidad del Aire: Mejorando los Pronósticos (Análisis y Perspectivas de Pronosticado)

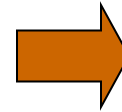
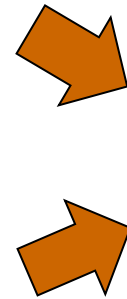
Modelo MET



CTM

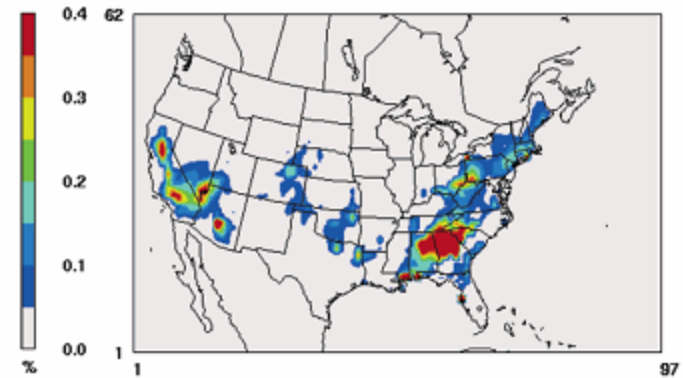


Emisiones



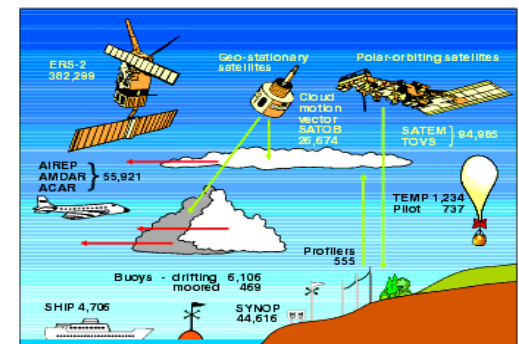
Cantidad Pronosticada:

*(p.ej., ozono infringe normas sobre la calidad del aire)*

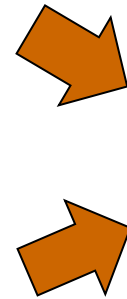
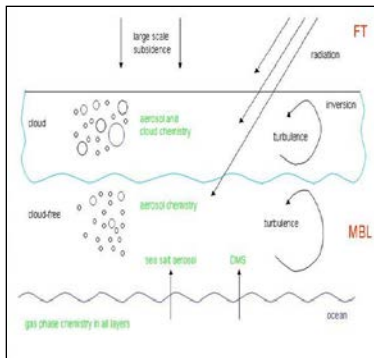


¿Cuánta confianza tenemos en los modelos y pronósticos?

Observaciones

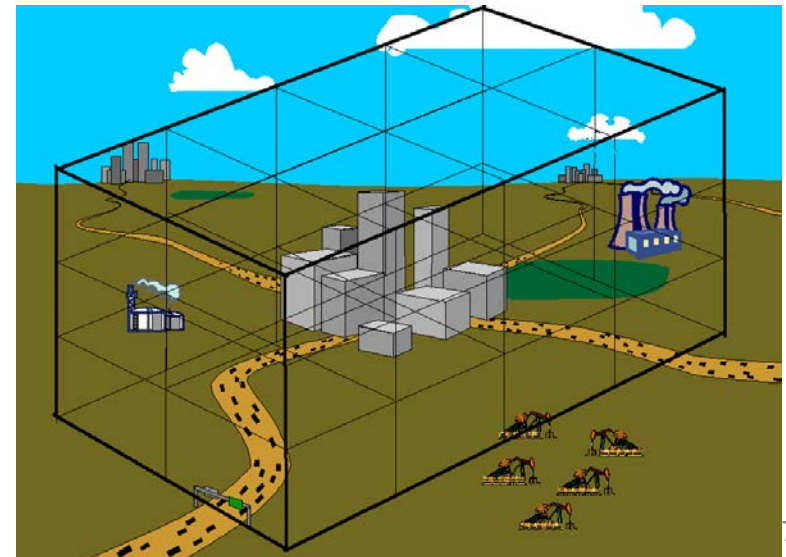
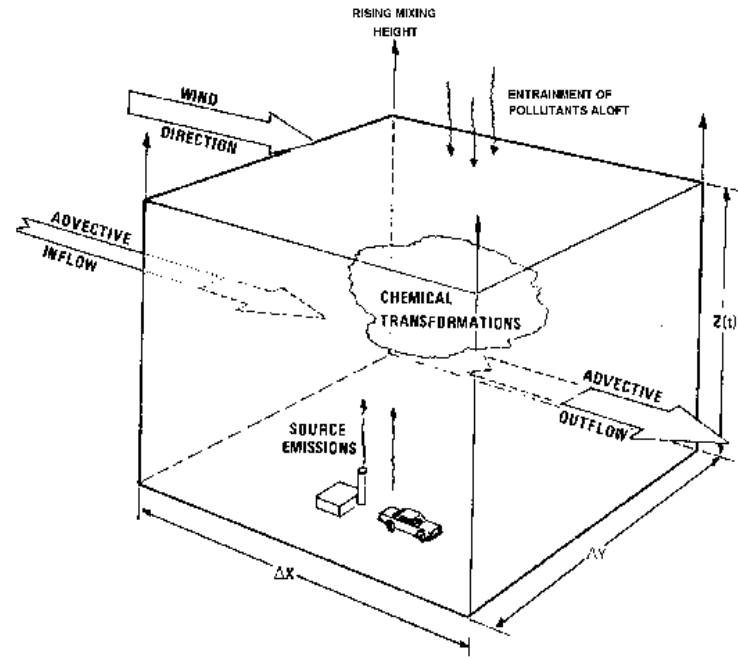


Módulos: Química, Aerosoles, Remoción



# Modelación Numérica de la Calidad del Aire

- Representa matemáticamente los procesos importantes que afectan a la contaminación.
- Requiere un sistema de modelos para simular la emisión, transporte, difusión, transformación y remoción de contaminantes atmosféricos.
  - Modelos de pronosticado meteorológico
  - Modelos de emisiones
  - Modelos de la calidad del aire



# Modelo de Transporte de Químicos

*(Chemical Transport Model – CTM)*

- Modelo 3D de transporte atmosférico de químicos (STEM-III)

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -u \cdot \nabla c_i + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho K \nabla c_i) + f_i(c) + E_i$$

donde las reacciones químicas son modeladas por términos no lineales rígidos.

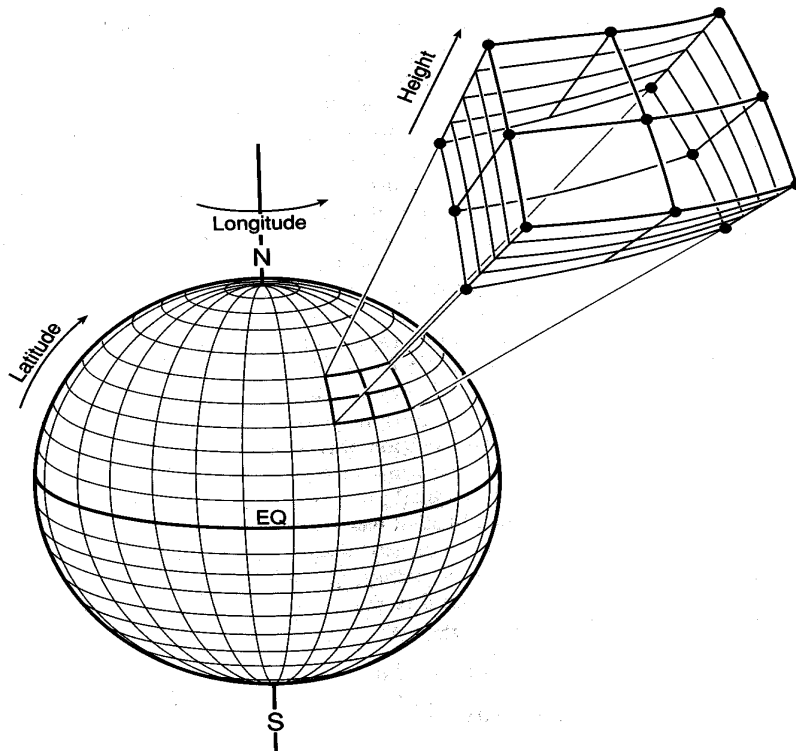
$$f_i(c) = P_i(c) - D_i(c)c_i$$

- Se aplica el desglose de operadores para resolver el CTM.

$$M_{[t, t+\Delta t]} = T_X^{\Delta t/2} \cdot T_Y^{\Delta t/2} \cdot T_Z^{\Delta t/2} \cdot C^{\Delta t} \cdot T_Z^{\Delta t/2} \cdot T_Y^{\Delta t/2} \cdot T_X^{\Delta t/2}$$

# Los Modelos Eulerianos Dividen el Dominio Atmosférico en Celdas Cuadriculares

Esto discretiza la ecuación de continuidad en el espacio.



Resuelven la ecuación de continuidad para cada celda.

- Hoy en día, los modelos detallados para químicos y aerosoles pueden abarcar  $10^6$  celdas.
- En los modelos globales, esto implica una resolución de  $\sim 0.5-1.0^\circ$  ( $\sim 50-100$  km) en lo horizontal y  $\sim 0.5-1.0$  km en lo vertical.
- Los modelos de transporte químico (CTM) utilizan datos meteorológicos externos como insumos (o bien se ejecutan en línea).
- Los modelos de circulación general (*general circulation models* – GCM) calculan sus propios campos meteorológicos.

# Desglose de Operadores en Modelos Eulerianos

## Reduce la Dimensionalidad del Problema

- Desglosar la ecuación de continuidad en aportes por transporte y procesos locales:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \left[ \frac{\partial C_i}{\partial t} \right]_{TRANSPORT} + \left[ \frac{dC_i}{dt} \right]_{LOCAL}$$

Transport  $\equiv$  advection, convection:  $\left[ \frac{dC_i}{dt} \right]_{TRANSPORT} = -\mathbf{U} \cdot \nabla C_i$

Local  $\equiv$  chemistry, emission, deposition, aerosol processes:

$$\left[ \frac{dC_i}{dt} \right]_{LOCAL} = P_i(\mathbf{C}) - L_i(\mathbf{C})$$

... e integrar cada proceso por aparte según cortes temporales discretos:

$$C_i(t_o + \Delta t) = (\text{Local}) \cdot (\text{Transport}) \cdot C_i(t_o)$$



Estos operadores pueden ser desglosados aun más:

- Desglosar el transporte en transporte unidimensional advectivo y transporte turbulento para x, y, z (normalmente necesario).
- Desglosar los procesos locales en química, emisiones, deposición (normalmente no necesario).

# Desglosando el Operador Transporte

- Velocidad del viento  $\mathbf{U}$  muestra fluctuaciones turbulentas en el tiempo  $\Delta t$ :

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{U} + \mathbf{U}'(t)$$

Componente de tiempo promediado (resuelto)   Componente fluctuante (stocástico)

- Desglosar el transporte en componentes advectivo (viento medio) y turbulento:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\mathbf{U} \bullet \nabla C_i + \frac{1}{\rho} \nabla \bullet \mathbf{K} \nabla C_i \quad \begin{array}{l} \rho \equiv \text{air density} \\ \mathbf{K} \equiv \text{turbulent diffusion matrix} \end{array}$$

advección      turbulencia (cierre de primer orden)

- Desglosar transporte aun más en x, y y z para disminuir la dimensionalidad.  
En dirección x:

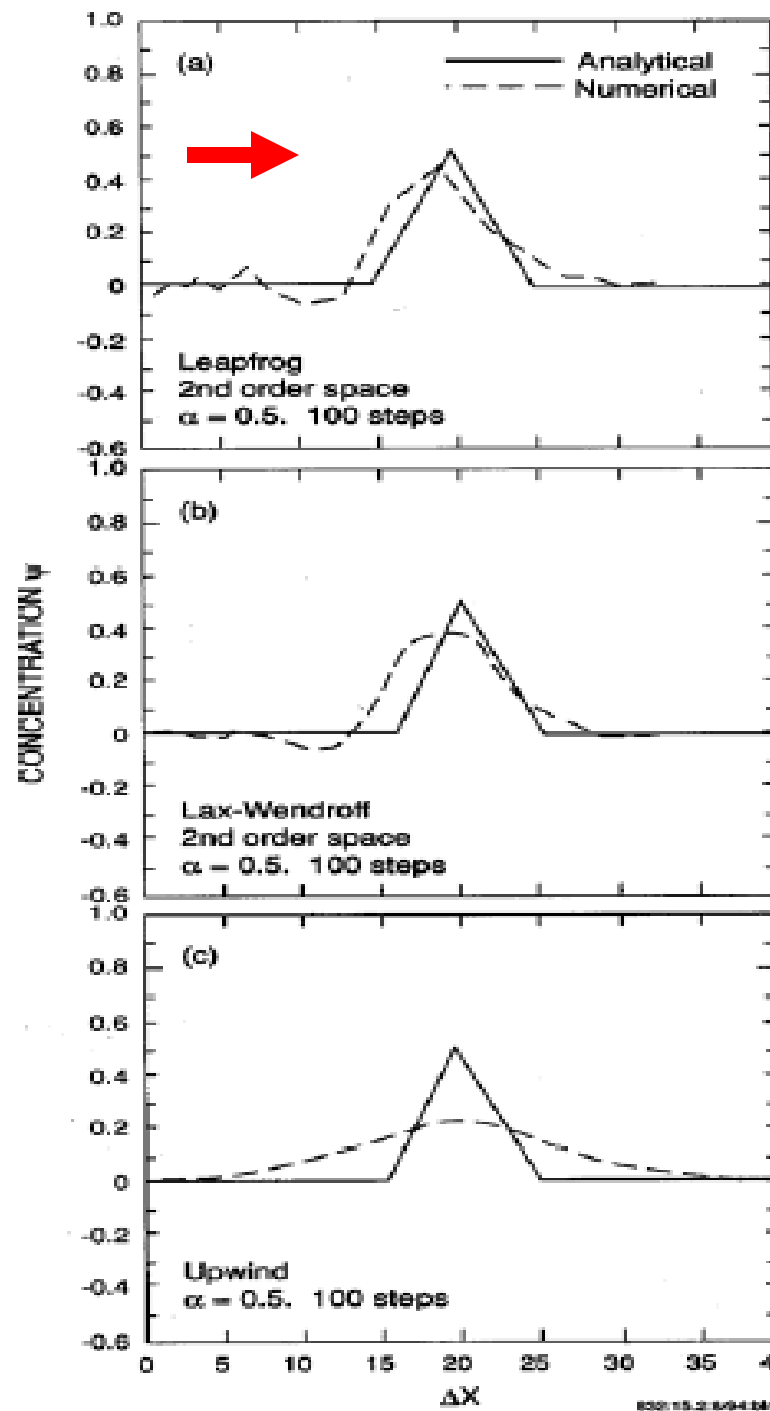
$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \left( K_{xx} \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) \quad \mathbf{U} = (u, v, w)$$

operador advectivo      operador turbulento

# Resolviendo la Ecuación Eulariana de Advección

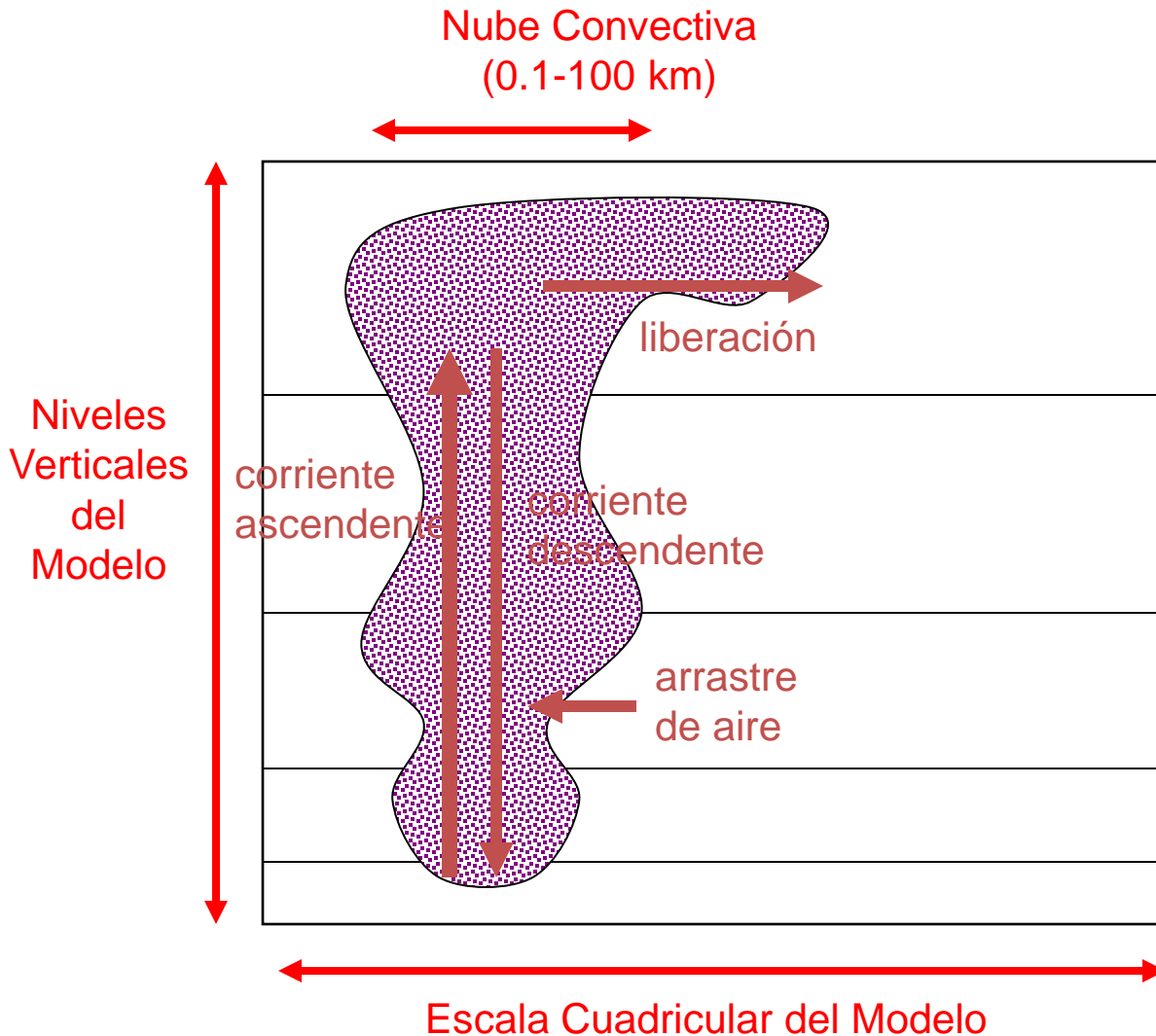
$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial x}$$

- La ecuación es *conservadora*: Hay que evitar la difusión o dispersión de componentes. También se necesita la conservación de masa, estabilidad, positividad, etc.
- Todo esquema requiere la aproximación de diferencias finitas entre los derivados: orden de aproximación → precisión de la solución.
- Esquemas clásicos: salto alternativo (*leapfrog*), Lax-Wendroff, Crank-Nicholson, viento arriba, momentos, etc.
- La estabilidad requiere un número Courant  $u\Delta t/\Delta x < 1$ ; limita la duración del plazo temporal.
- Al tomar en cuenta otros requerimientos (como la positividad), se introduce la no linealidad en el esquema de advección.



# Transporte Turbulento Vertical (Flotación)

- Generalmente domina sobre la advección vertical media.
- Difusión-K es aceptable para la convección seca en la capa de fricción (pequeños remolinos).
- La convección más profunda (húmeda) requiere la parametrización convectiva no localizada.

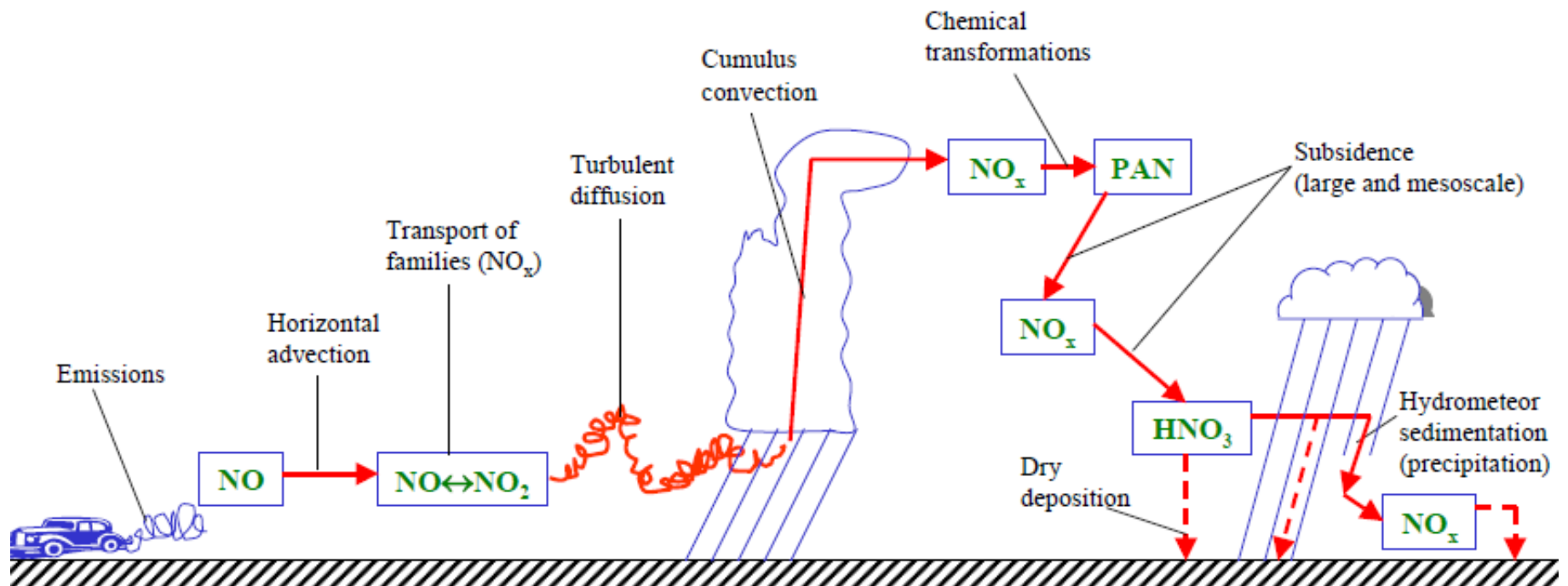


En los modelos globales, la convección húmeda queda a subescala, por lo que debe ser tratada como intercambio vertical de masa independiente del transporte por vientos de escala cuadrada.

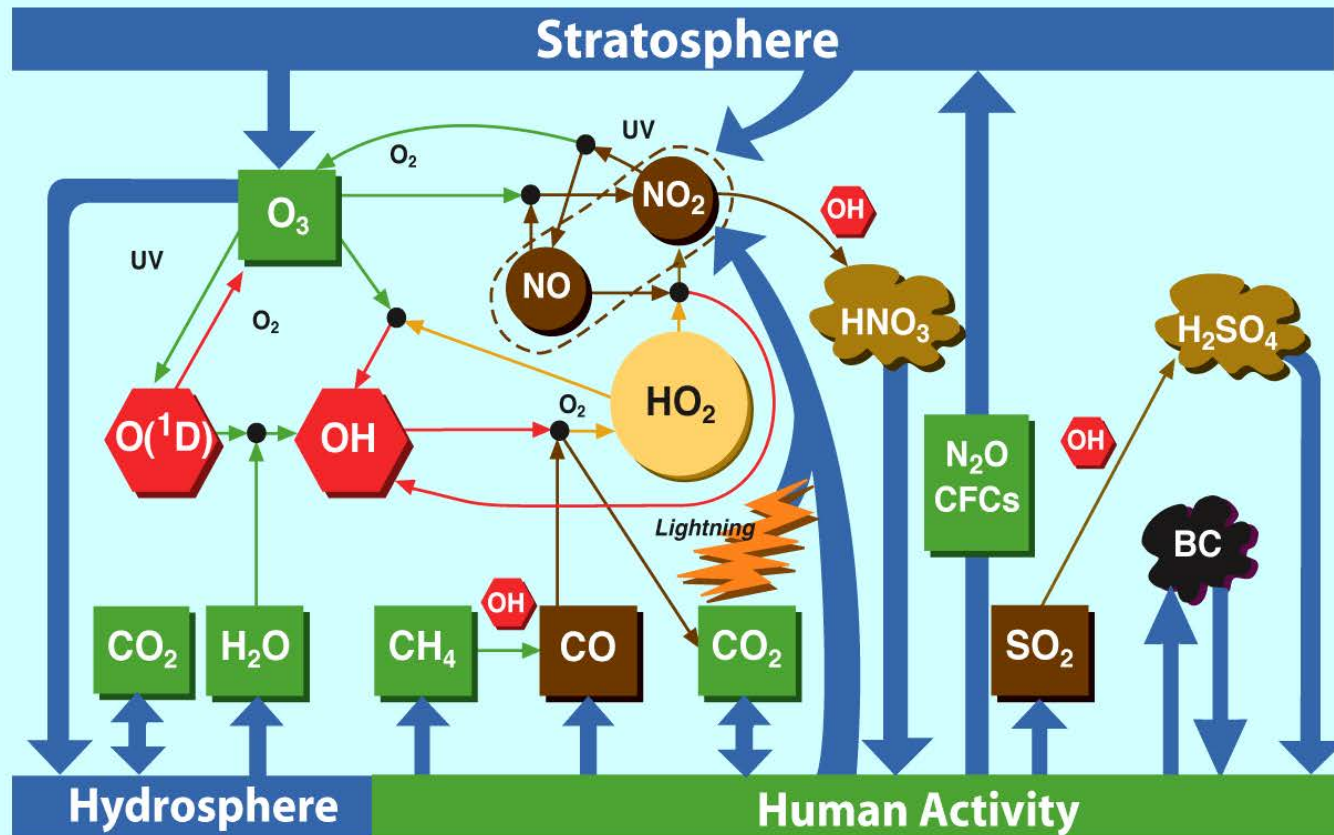
Se requiere información sobre los flujos de masa convectivos del impulsor meteorológico del modelo.

# Factors Controlling Tracer Distributions

## Example: Reactive Nitrogen



# Interactions Between Air Pollution and Climate



Greenhouse Gases
Primary Pollutants
Absorbing Aerosols (BC)

Reactive Free Radical/Atom
Less Reactive Radicals
Reflective Aerosols

## Operador Local (Química):

Resuelve el Sistema ODE para  $n$  Especies Interactuantes

Para cada especie:  $i \in [1, n]$

$$\frac{dC_i}{dt} = P_i(\mathbf{C}) - L_i(\mathbf{C}) \quad \mathbf{C} = (C_1, \dots, C_n)$$

El sistema típicamente es 'rígido' (vida útil varía por muchos órdenes de magnitud).

→ Se necesita metodología de solución implícita.

- Método más sencillo: Euleriano Inverso – Transformar en sistema de  $n$  ecuaciones algebraicas con  $n$  desconocido.

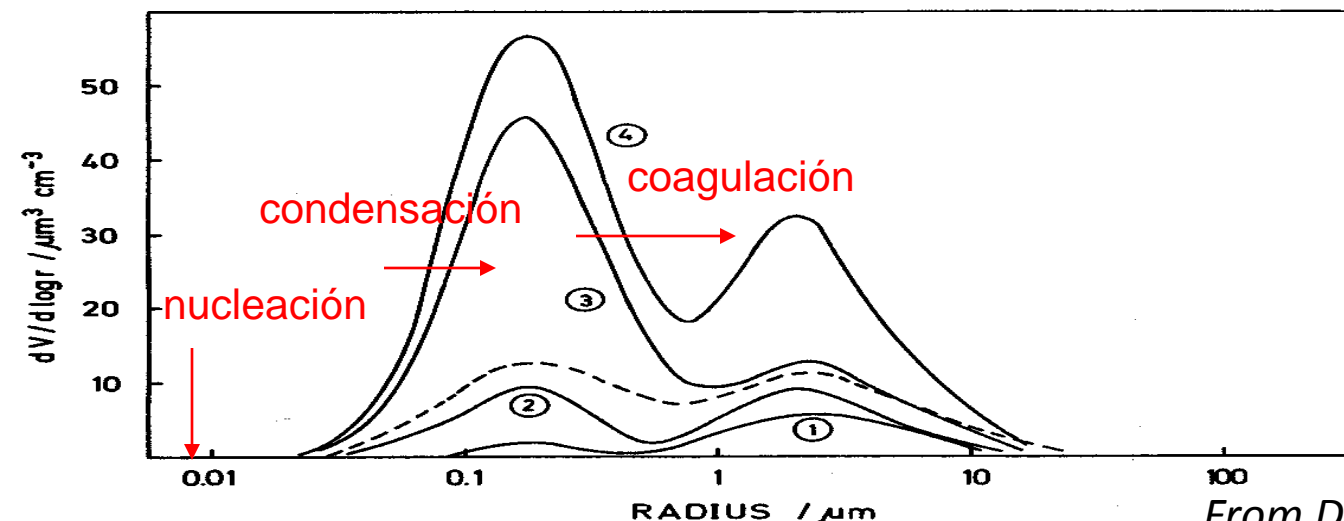
$$\mathbf{C}(t_o + \Delta t)$$

$$\frac{C_i(t_o + \Delta t) - C_i(t_o)}{\Delta t} = P_i(\mathbf{C}(t_o + \Delta t)) - L_i(\mathbf{C}(t_o + \Delta t)) \quad i \in [1, n]$$

Resolver (p.ej., por el método de Newton). El método euleriano inverso es estable, conservador de masa y flexible (puede incorporar otras limitaciones como el estado estable, cierre de familia química, etc., en lugar de  $\Delta C/\Delta t$ ), pero es costoso. La mayoría de modelos 3D emplean esquemas implícitos de orden mayor como el Método Gear.

# Aspectos Específicos para las Concentraciones de Aerosoles

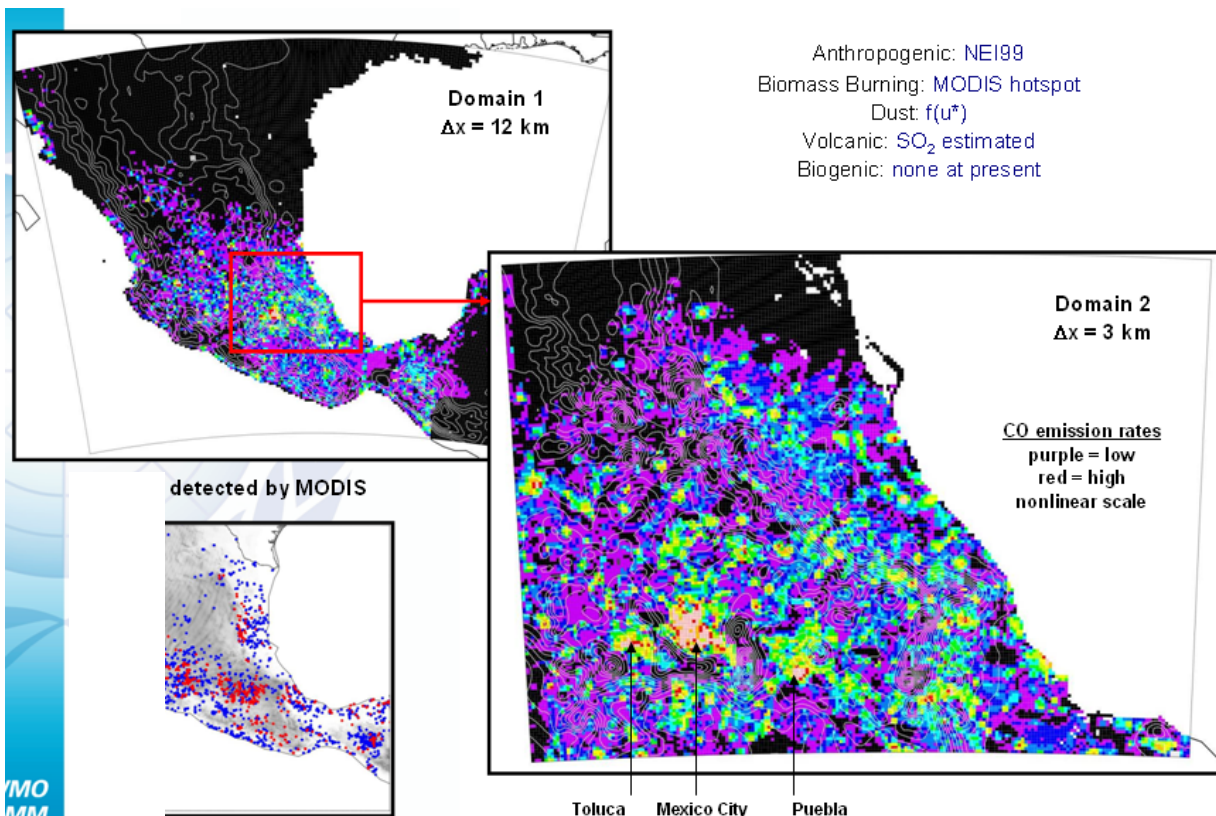
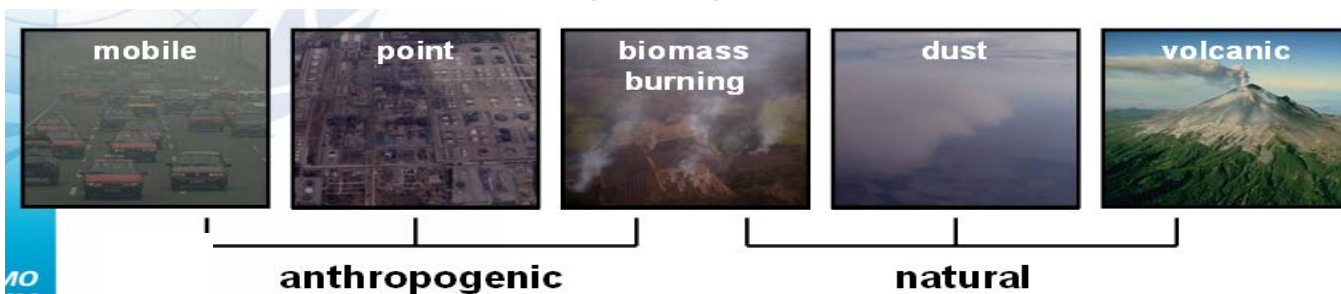
- Una partícula dada de aerosol se caracteriza por su **tamaño, forma, fases y composición química** – ¡gran cantidad de variables!
- Las mediciones de concentraciones de aerosoles deben expresarse en algún formato **integral** que suma todas las partículas con cierta propiedad presentes en un volumen de aire dado.
- Si no se resuelve la evolución de la distribución de tamaños, la ecuación de continuidad para especies de aerosoles puede ser aplicada de la misma forma que para gases.
- Para simular la evolución de la distribución de tamaños de aerosoles, se requiere incluir términos de nucleación/crecimiento/coagulación en  $P_i$  y  $L_i$ , más la caracterización de tamaños por categorías o por momentos.



Distribuciones Típicas  
de Aerosoles por  
Volumen

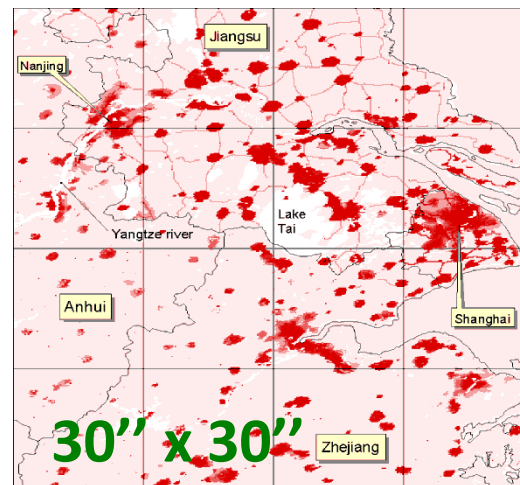
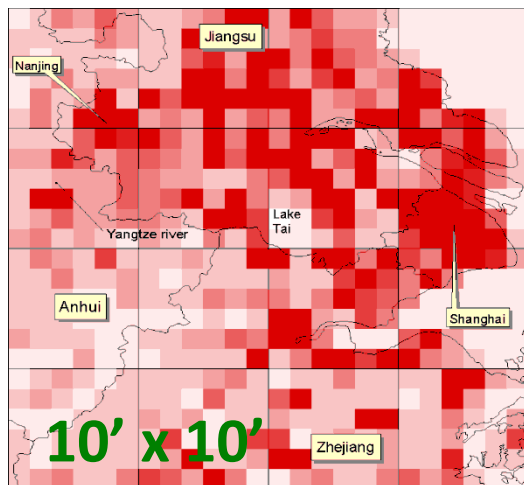
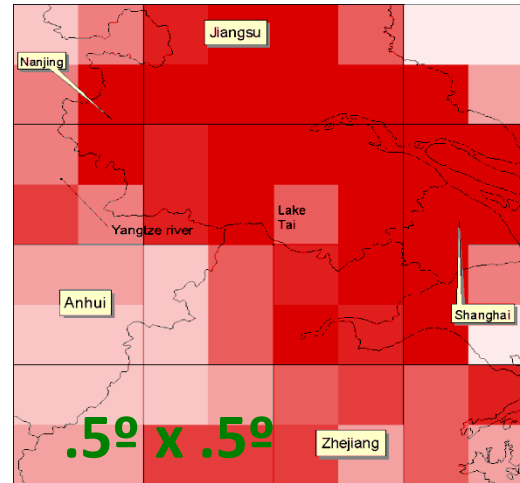
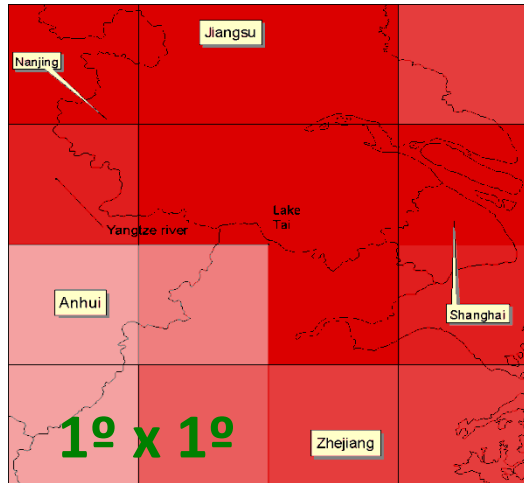
From D. Jacob

# Hay que Estimar las Emisiones con la Escala Apropiable



MO  
MM

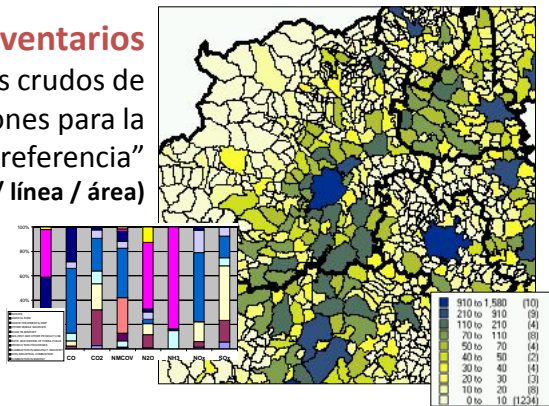
# Detalle: Un Asunto de Escala (3)



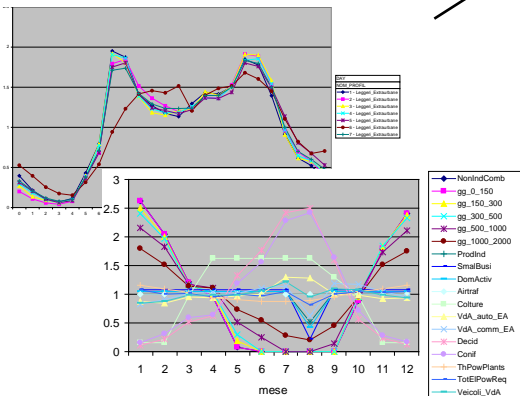
Emisiones de SO<sub>2</sub>  
en el Area de  
Shanghai, China

# Procesamiento de Emisiones para Monitorear la Calidad del Aire

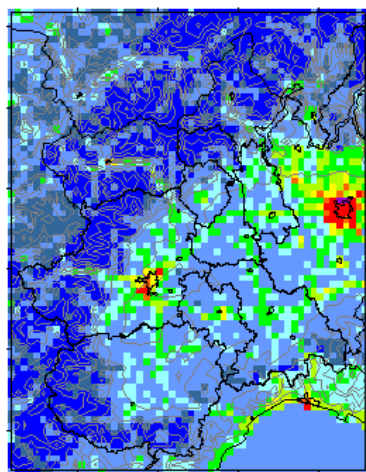
**Inventarios**  
 "datos crudos de emisiones para la referencia"  
 (punto / línea / área)



**Perfiles de Modulación**  
 (horarios/diarios/mensuales)



**Insumos Listos para Modelos**  
 (emisiones por hora, celda y especie)

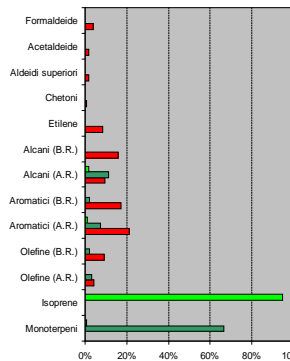
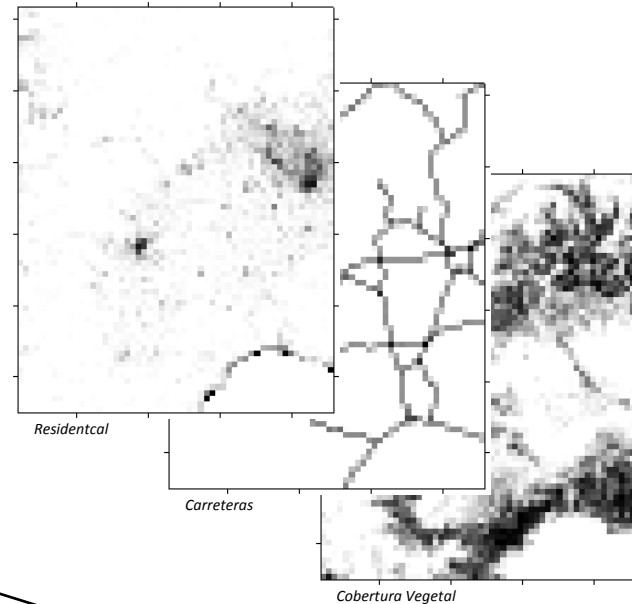


**DESAGREGACION DEL ESPACIO**

**MODULACION DEL TIEMPO**

**ESPECIACION Y DIMENSIONAMIENTO DE NMVOC & PM**

**Datos Temáticos**



**Perfiles de especiación y dimensionales**

# Otros Tipos de Datos sobre Emisiones

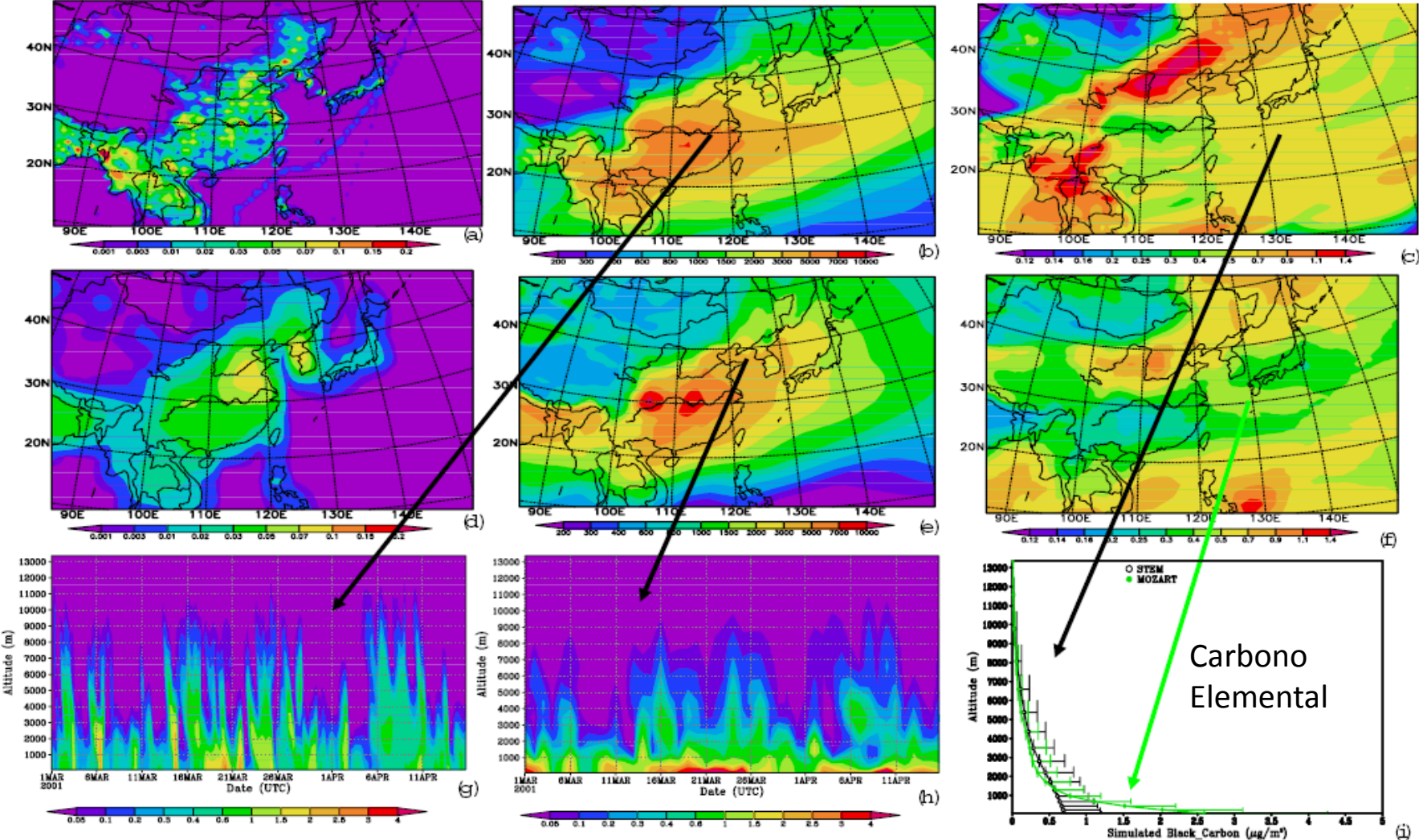
- Emisiones estimadas ‘en línea’ con base en la meteorología actual.
  - polvo desértico
  - sal marina y sulfuro de dimetilo
  - incendios forestales
  - emisiones biogénicas
- Datos registrados por sistemas de monitoreo de emisiones instalados en plantas industriales.
- Tránsito en tiempo real.
- Descargas o liberaciones accidentales.

# Ejemplo de Cambios en la Resolución para Emisiones

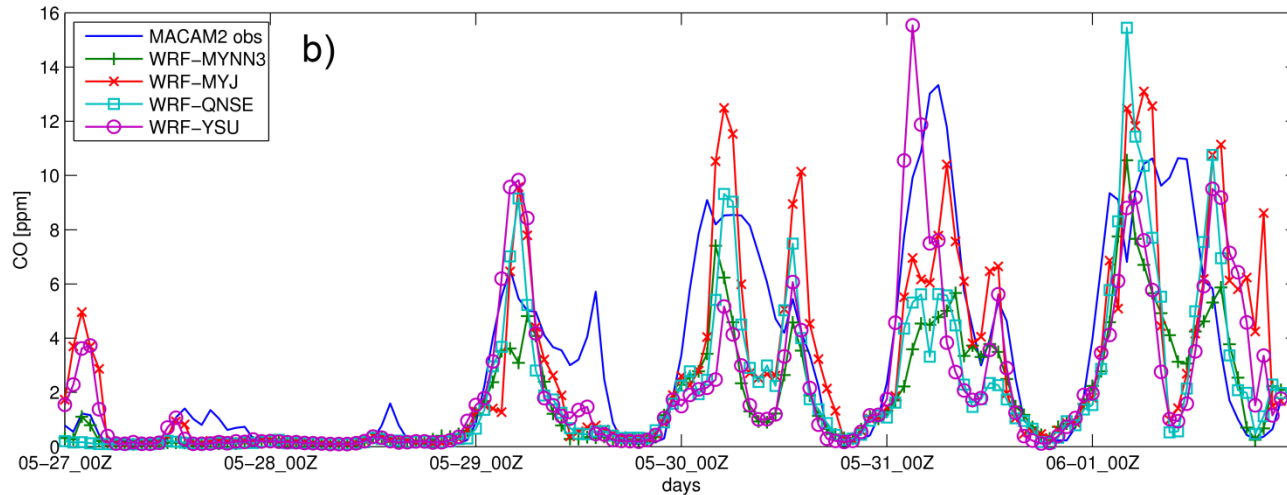
*Emisiones*

*Concentraciones Mensuales Medias*

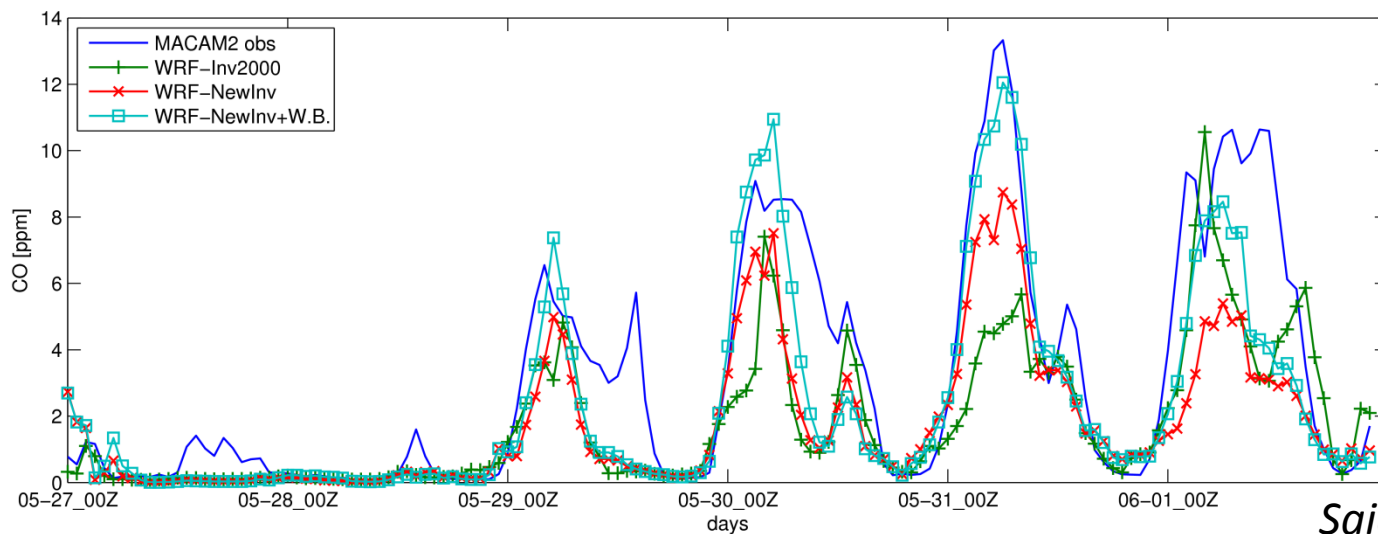
*Variación Temporal en Concentraciones*



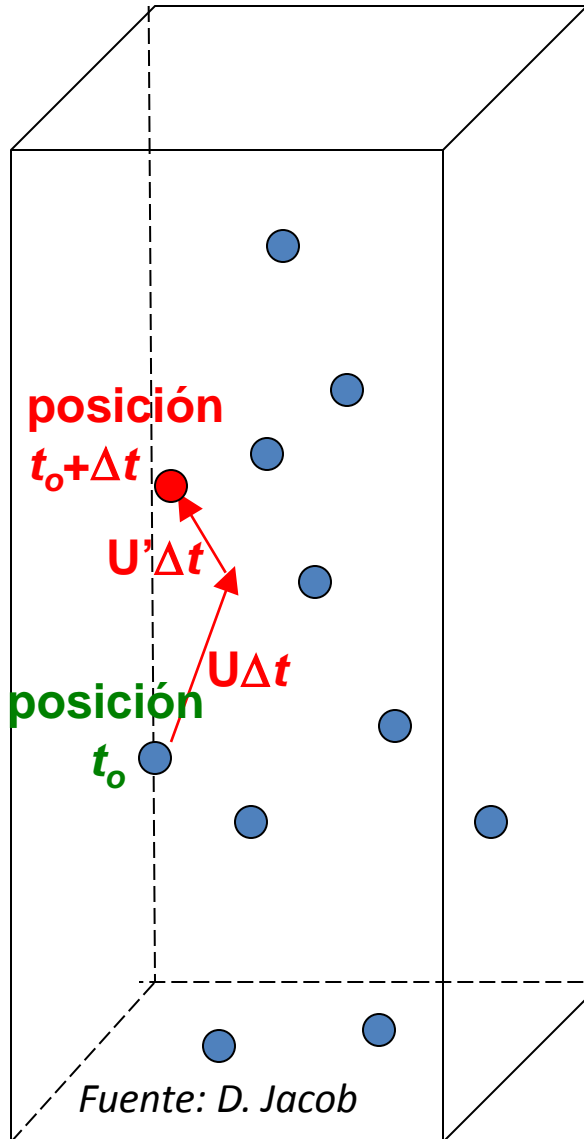
# Sensibilidades ante Diferentes Esquemas de Parametrización para la Capa de Fricción



# Sensibilidad ante la Distribución Espacial de Emisiones



# Metodología Lagrangiana: Rastrear el Transporte de Puntos en el Dominio del Modelo (Domino No Cuadrangular)



- Transporte de gran cantidad de puntos con trayectorias basadas en insumos de la base de datos meteorológica ( $U$ ) más el componente de turbulencia aleatoria ( $U'$ ) para uno o más cortes temporales  $\Delta t$ .
- Los puntos tienen masa pero no tienen volumen.
- Determinar las concentraciones locales por la cantidad de puntos dentro de un volumen dado.
- La química no lineal requiere el mapeo euleriano para cada corte temporal (semi-lagrangiano).

## Ventajas respecto a los modelos eulerianos:

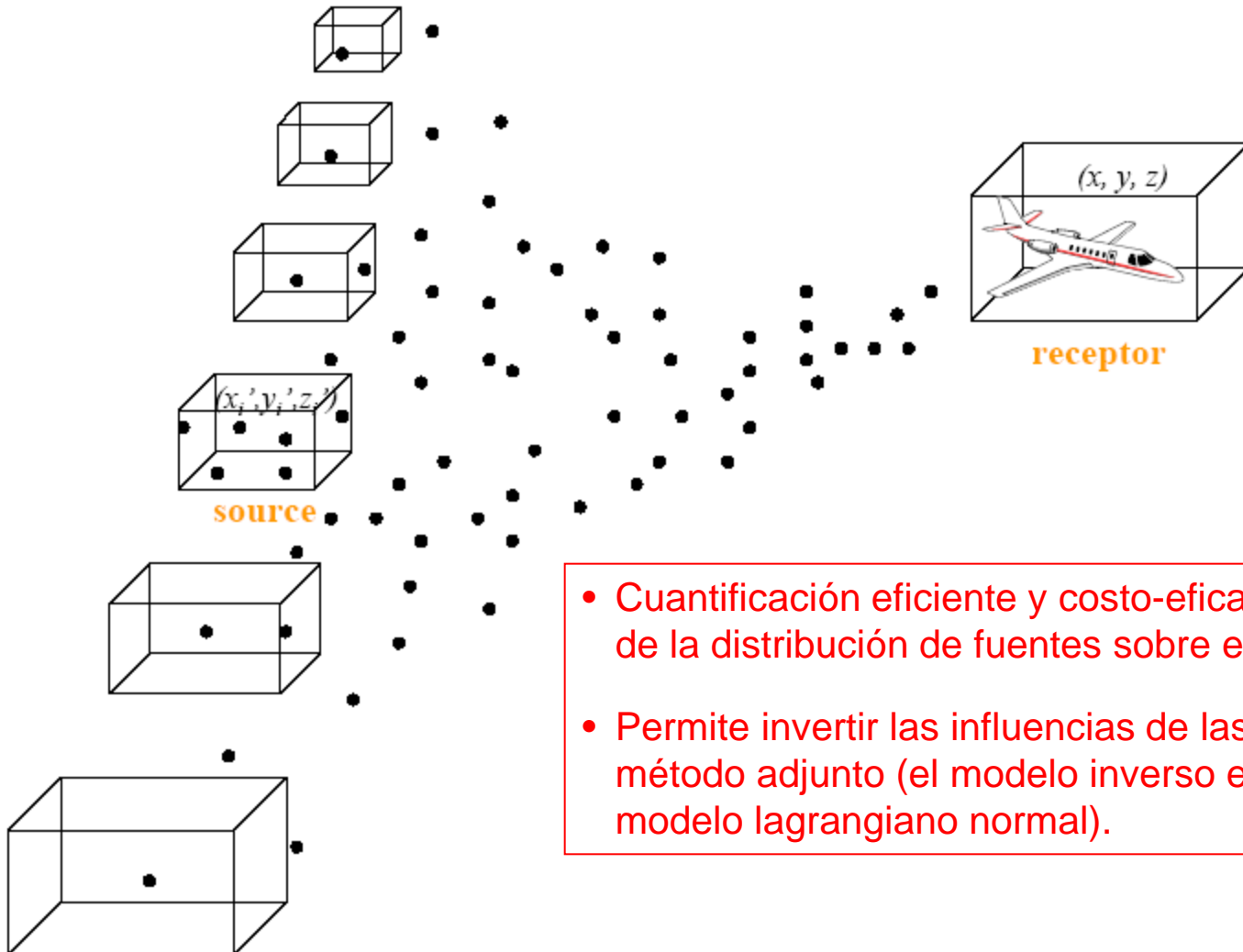
- Ninguna restricción por números Courant.
- Ninguna difusión ni dispersión numérica.
- Facilidad para rastrear historial de un volumen de aire.
- Se puede invertir respecto al tiempo.

## Desventajas:

- Se necesita una gran cantidad de puntos para estadísticas.
- Representación no homogénea del dominio.
- Pobre representación de la convección.
- La química no lineal es problemática.

# Modelación Lagrangiana Orientada al Receptor

Se ejecuta el modelo lagrangiano en sentido inverso desde la ubicación del receptor, liberando los puntos únicamente en ese lugar.



- Cuantificación eficiente y costo-eficaz de la influencia de la distribución de fuentes sobre el receptor ('huella').
- Permite invertir las influencias de las fuentes con el método adjunto (el modelo inverso es el adjunto del modelo lagrangiano normal).

# Desarrollando un Modelo Numérico

- Diseñar y planificar el sistema (contaminantes, dominios, modelos, emisiones, observaciones y hardware).
- Identificar y asignar los recursos (personal, almacenamiento, transferencia de datos).
- Adquirir los datos geofísicos requeridos (p.ej., uso de suelo).
- Implementar las herramientas de adquisición y procesamiento de datos, los componentes del modelo (emisiones, meteorología, calidad del aire), y programas analíticos.
- Desarrollar el inventario de emisiones (adquirir, revisar, actualizar).
- Probar, evaluar y perfeccionar los componentes del sistema (programas de adquisición de datos, herramientas de procesamiento, modelo meteorológico y de calidad del aire) bajo condiciones distintas.
- Integrar los componentes (p.ej., elaborar protocolos).
- Probar, evaluar y perfeccionar el sistema operacional (convalidar constantemente contra observaciones).

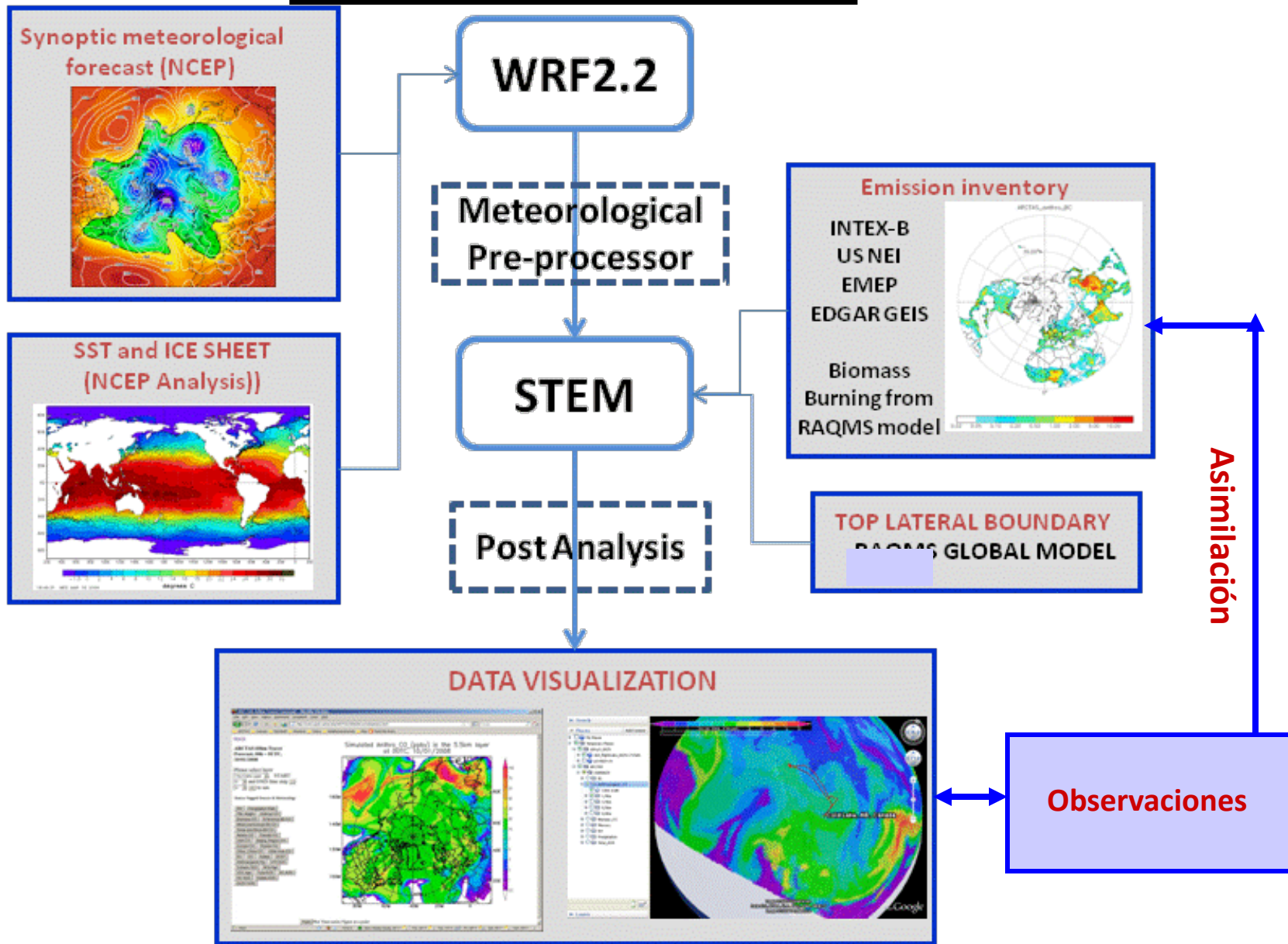
# **Modelos Numéricos para la Calidad del Aire: Fortalezas**

- Se basan en fenómenos, simulando los procesos físicos y químicos complejos que causan la formación y destrucción de contaminantes atmosféricos.
- Pueden orientar el pronosticado para áreas geográficas extensas.
- Pueden pronosticar la contaminación atmosférica en áreas donde no se monitorea la calidad del aire (escalas temporales y espaciales detalladas).
- El pronóstico generado por estos modelos puede ser presentado en forma de mapas que muestran cómo la calidad del aire variará cada hora en la región.
- Los modelos también se pueden aprovechar para entender mejor los procesos que controlan la contaminación atmosférica en una área específica (estudios de sensibilidad).
  - Por ejemplo, se pueden emplear para evaluar la importancia de las fuentes locales de emisiones o del transporte sobre largas distancias.

# Modelos Numéricos para la Calidad del Aire: Limitaciones

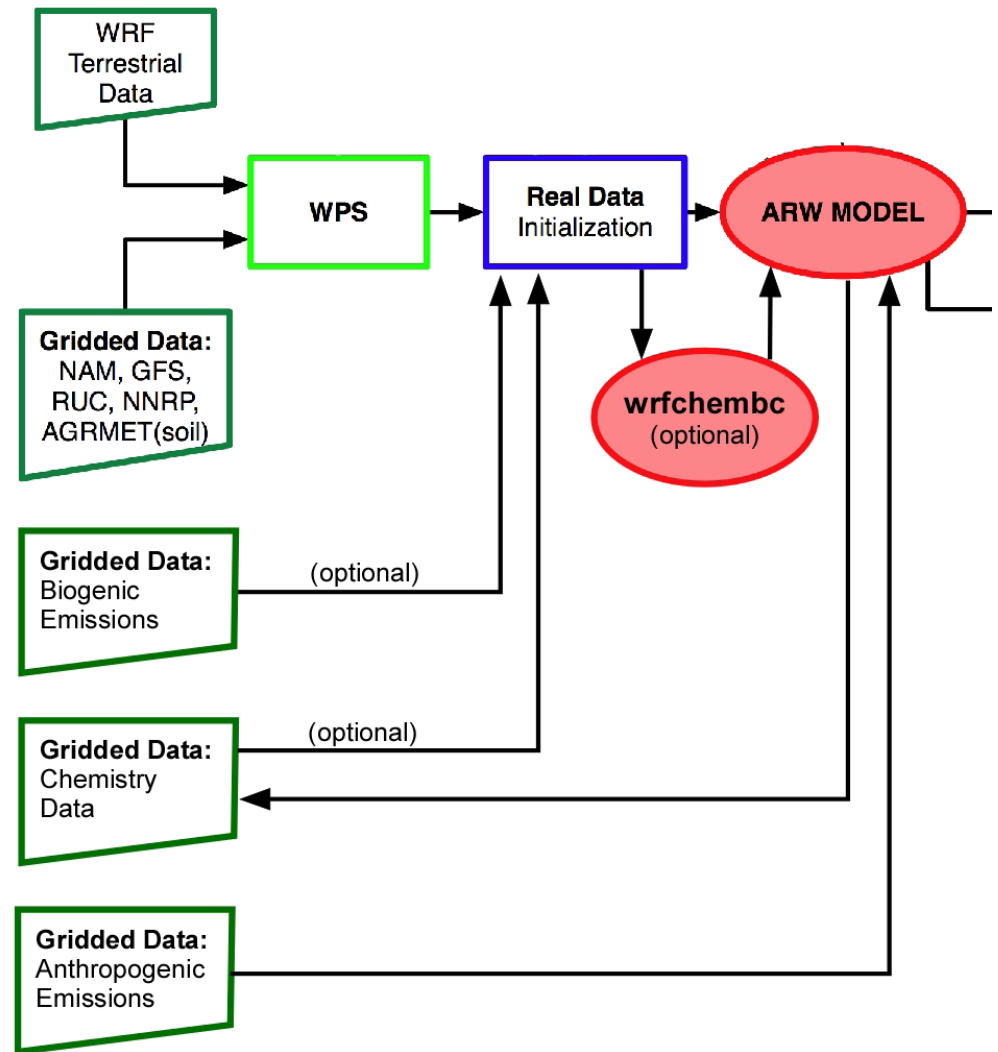
- La imprecisión en los pronósticos de la velocidad del viento, dirección del viento, mezclado vertical y aislamiento solar pueden afectar el desempeño de los modelos pronosticadores de la calidad del aire.
- Los inventarios de emisiones empleados para los modelos actuales muchas veces están desactualizados y basados en factores inciertos y niveles de actividad relacionados con las emisiones.
- Se requiere dedicar recursos humanos e informáticos significativos para establecer un sistema pronosticador de la calidad del aire bien fundamentado científicamente, automatizado y basado en un modelo tridimensional de la calidad del aire.
- La interpretación del producto numérico de un modelo pronosticador de la calidad del aire requiere experiencia y pericia.
- No se debe depender del producto del modelo como técnica pronosticadora única, sino aprovecharlo para complementar otras técnicas más básicas.

# Marco del Sistema STEM



# WRF-CHEM

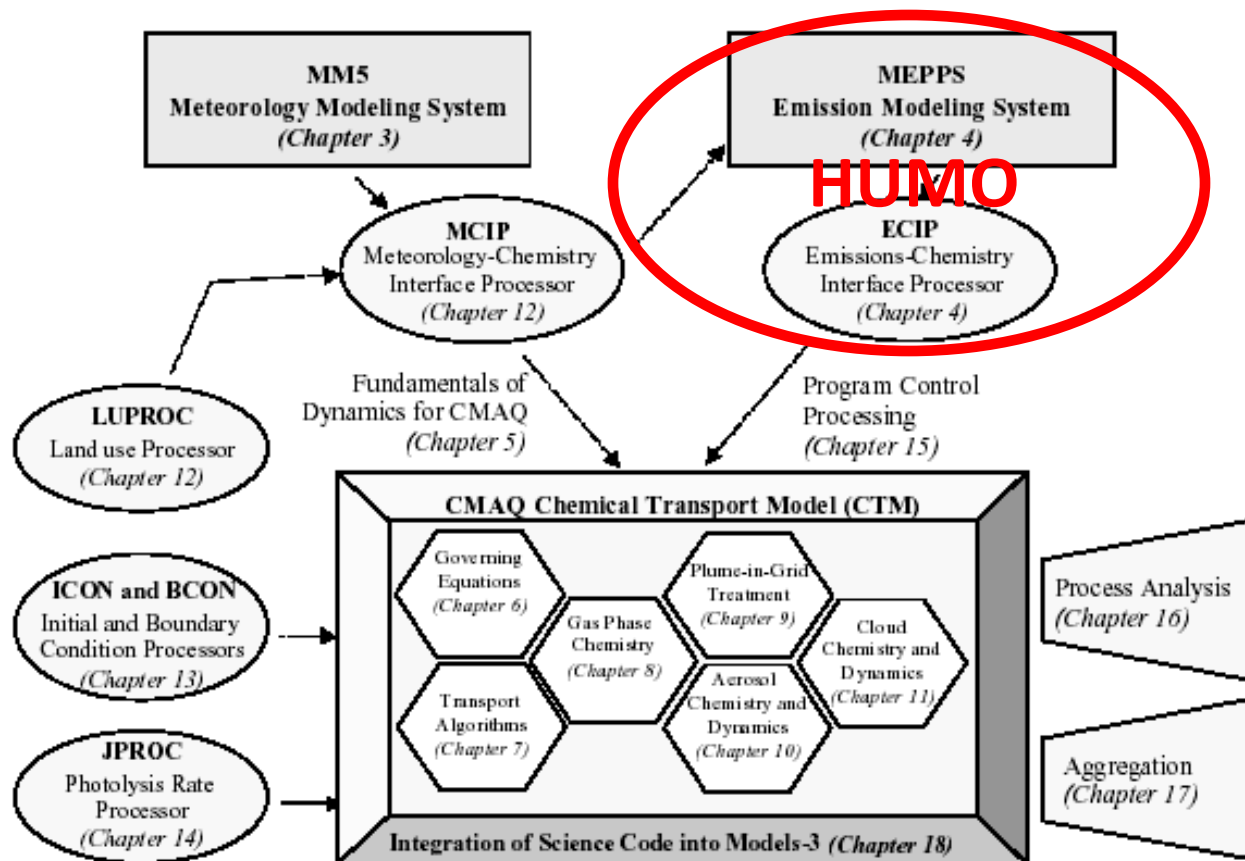
- Química 'en línea' plenamente acoplada.
- Utiliza variables meteorológicas para cada corte temporal.
- Se calculan varias categorías de emisiones en línea (biogénicas, polvo, sal marina, sulfuro de dimetilo, quema de biomasa).
- Efectos directos (radiación) e indirectos (nubes) de aerosoles sobre la meteorología.



# Sistema de Modelación CMAQ

*(Modelo Multi-Escala Comunitario de la Calidad del Aire)*

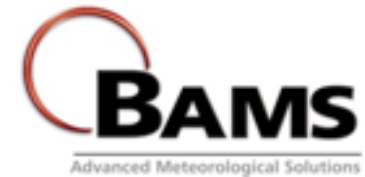
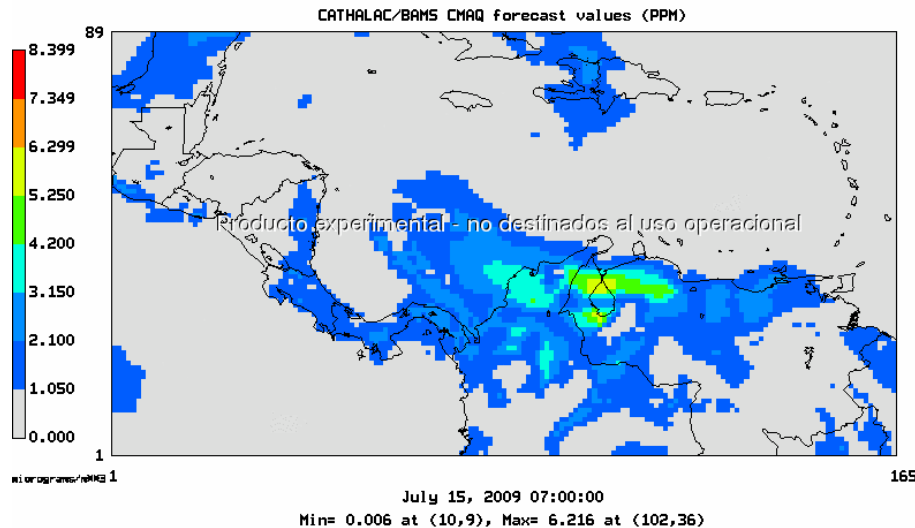
- Modelo utilizado por la USEPA para pronosticar el ICA.
- Además de los químicos y aerosoles acostumbrados, este modelo puede pronosticar la visibilidad, deposiciones acídicas y toxinas.
- Se está desarrollando una versión WRF-CMAQ en línea.



# Modelo Numérico SERVIR de Calidad del Aire para Mesoamérica



PM2.5 for grid PA27B



John McHenry, Jefe de Científicos, BAMS  
E-Mail: [john.mchenry@baronams.com](mailto:john.mchenry@baronams.com)  
Oficina: (919) 424-4443

# Modelo Numérico SERVIR de Calidad del Aire

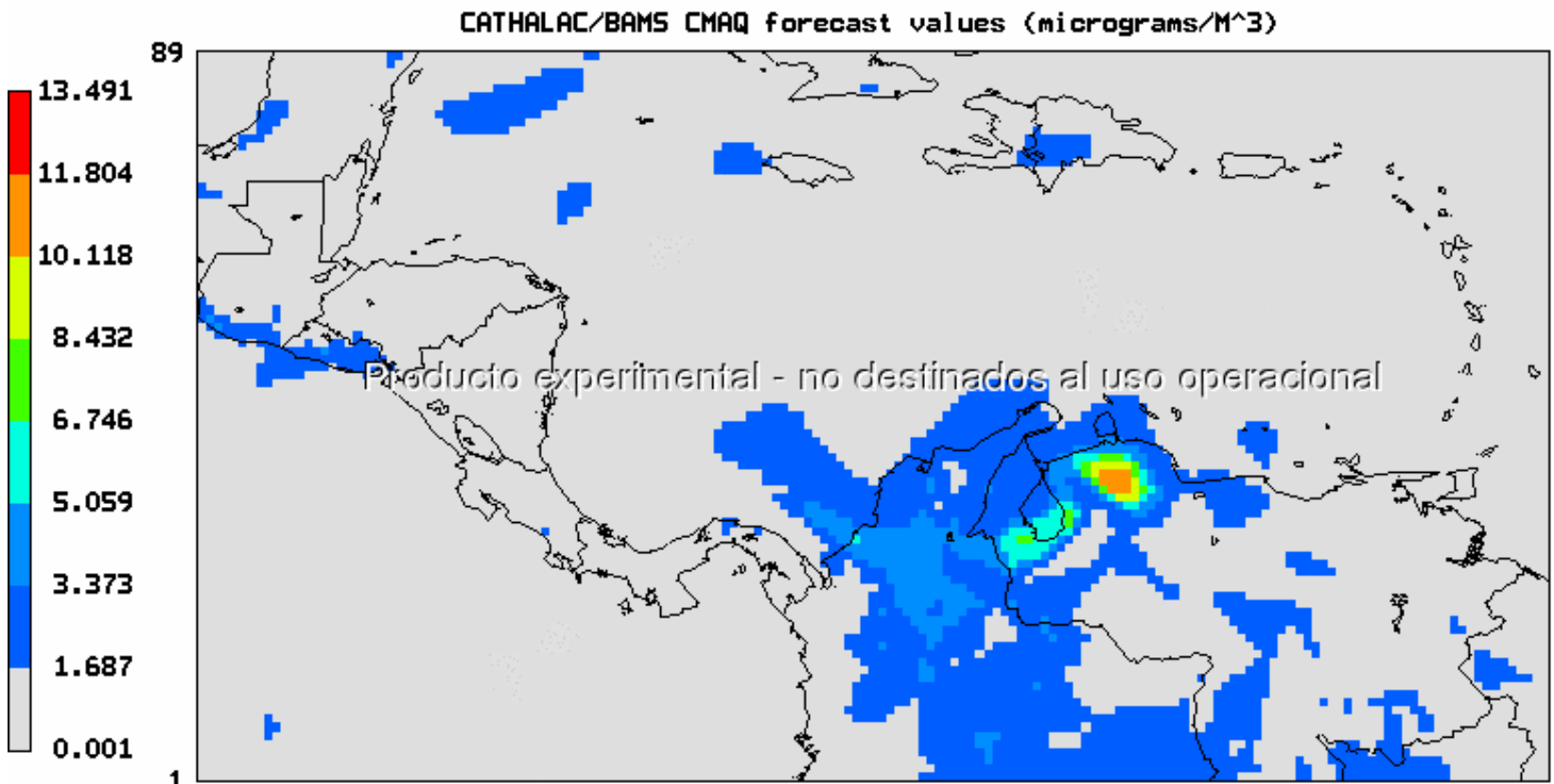
- Versión actual desarrollada por Baron Advanced Meteorological Systems (BAMS) e instalada en CATHALAC (Panamá).
- La versión actual utiliza el modelo meteorológico MM5 del CATHALAC y el modelo CMAQ de calidad del aire, junto con un inventario de emisiones contaminantes estimados para Mesoamérica.
- El Programa SERVIR está revisando y actualizando el modelo:
  - La nueva versión utilizará el Modelo WRF en lugar del MM5.
  - Su base será en la Sede SERVIR en Huntsville, Alabama, EE.UU.
  - Como opción se podrá incorporar un inventario de emisiones para cada país.
- El Modelo SERVIR genera insumos para el pronosticado de concentraciones de  $PM_{2.5}$  y  $O_3$  a nivel de suelo.

# Productos Generados por el Modelo Numérico SERVIR de Calidad del Aire

- Los investigadores y analistas de la calidad del aire podrán utilizar los productos del Modelo SERVIR para ayudar a analizar y pronosticar eventos de contaminación atmosférica en Mesoamérica.
- Orientación diaria que ayudan a elaborar pronósticos para nivel de suelo de:
  - $PM_{2.5}$
  - $O_3$
- Resolución espacial: 27km y 9km
- Pronósticos de hasta 42 horas.

# Ejemplo de Producto del Modelo SERVIR para PM<sub>2.5</sub> a una Hora – Resolución a 27 Km.

PM<sub>2.5</sub> for grid PA27B



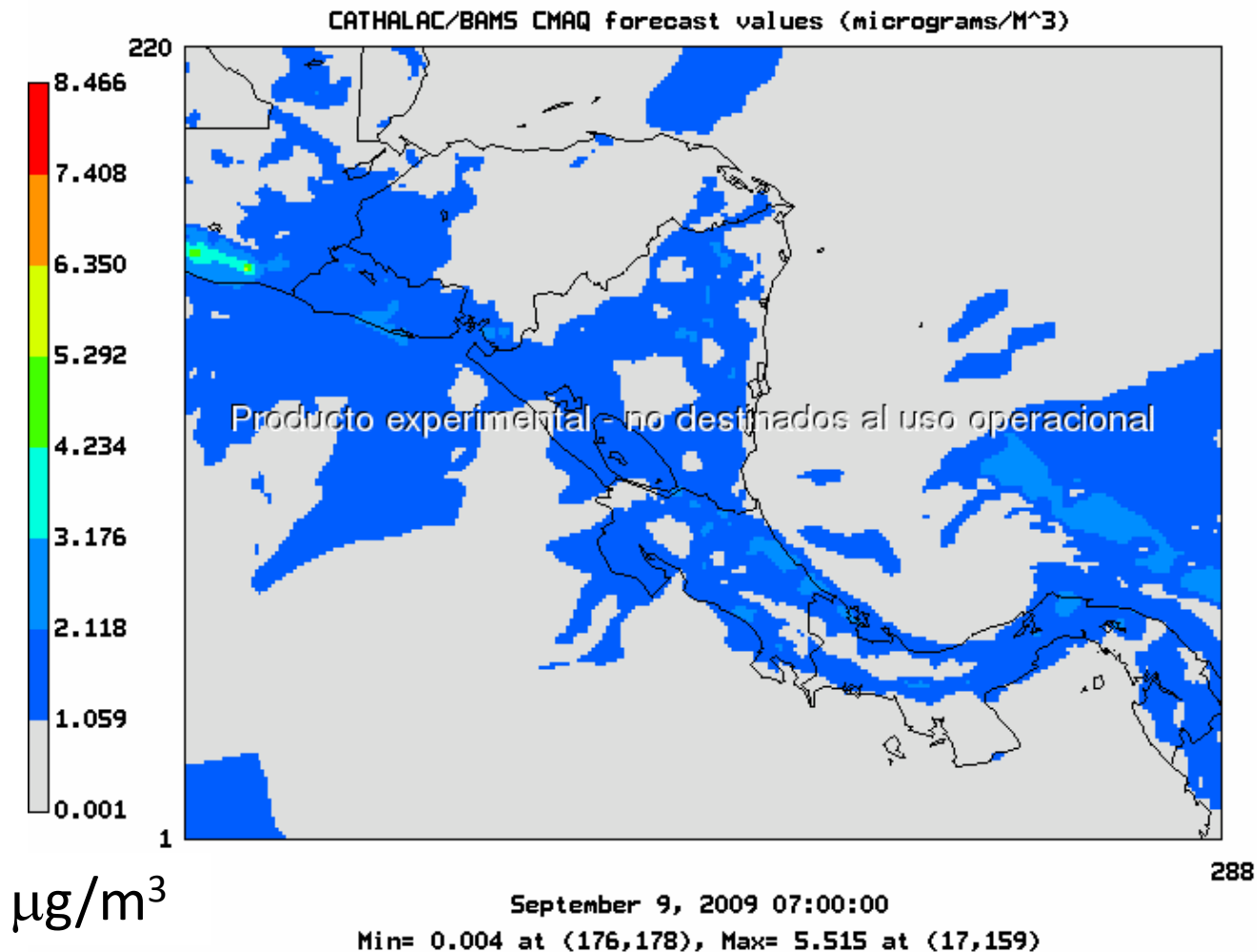
$\mu\text{g}/\text{m}^3$

September 9, 2009 03:00:00

Min= 0.014 at (142,86), Max= 11.524 at (113,37)

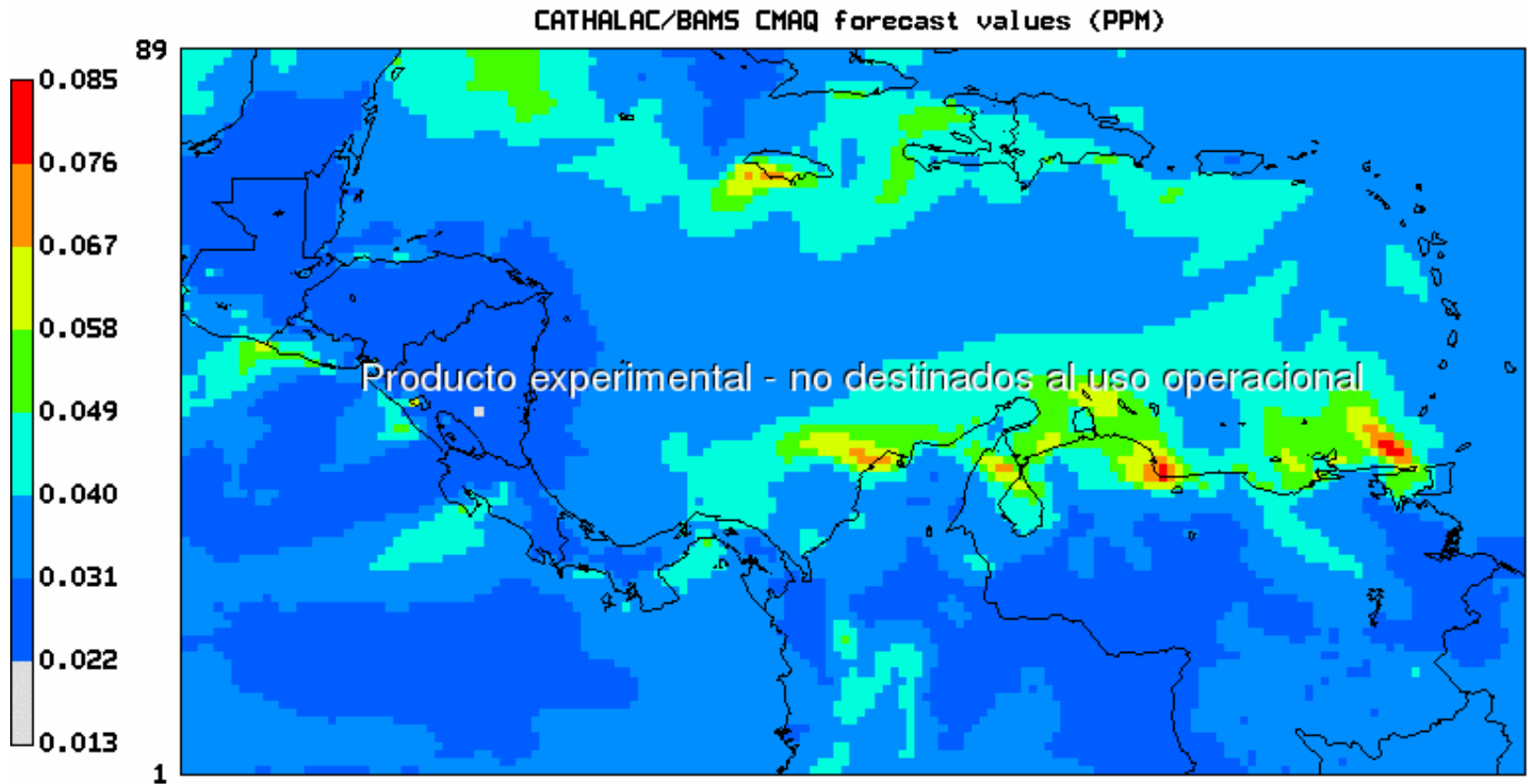
# Ejemplo de Producto del Modelo SERVIR para PM<sub>2.5</sub> a una Hora – Resolución a 9 Km.

PM2.5 for grid PA09B



# Ejemplo de Producto del Modelo SERVIR para O<sub>3</sub> a una Hora – Resolución a 27 Km.

O<sub>3</sub> for grid PA27B



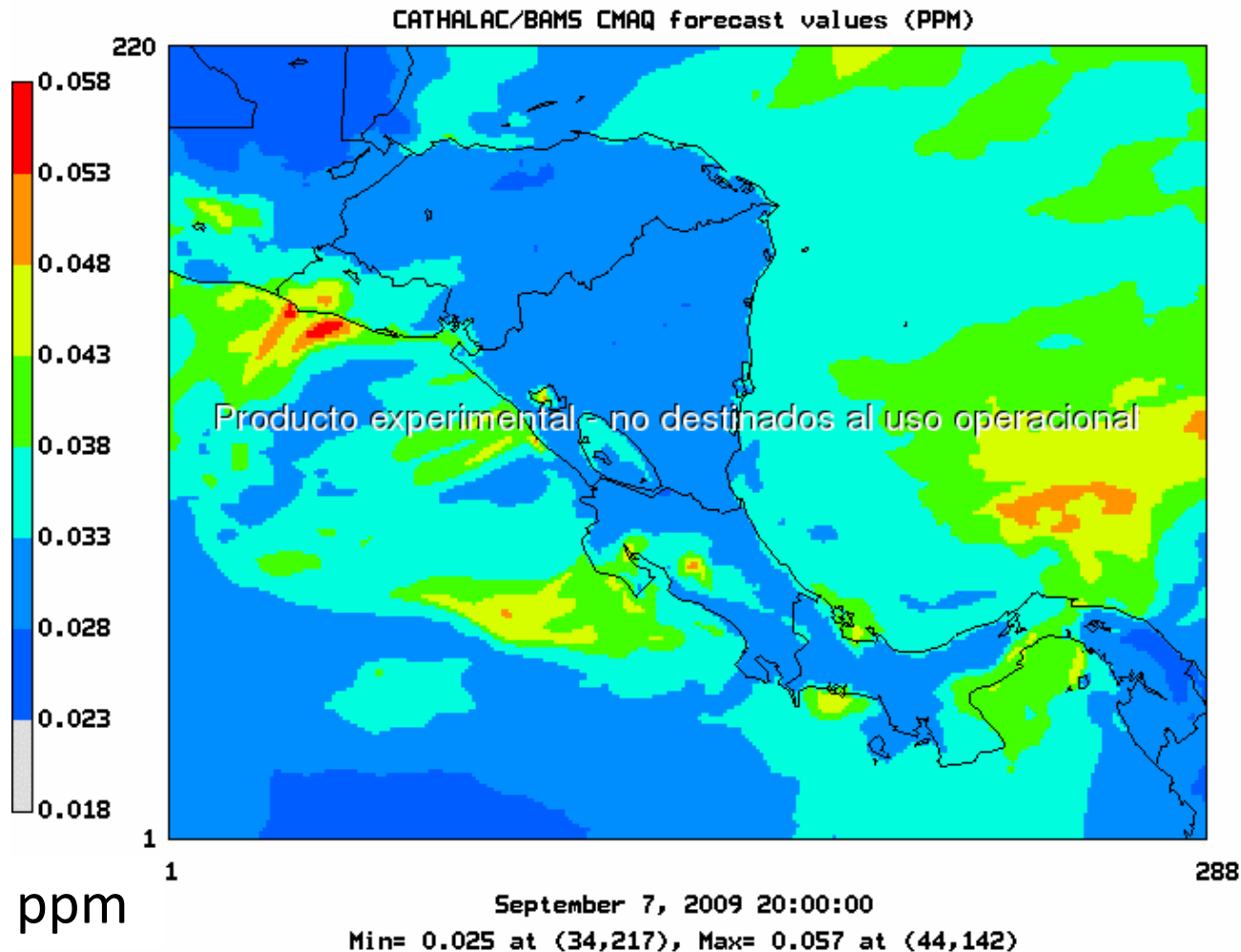
ppm

September 3, 2009 20:00:00

Min= 0.022 at (37,45), Max= 0.083 at (149,40)

# Ejemplo de Producto del Modelo SERVIR para O<sub>3</sub> a una Hora – Resolución a 9 Km.

O<sub>3</sub> for grid PA09B



# Próximos Pasos para el Modelo SERVIR

- Transición completa hacia el modelo meteorológico WRF.
- Se necesita retroalimentación de posibles usuarios sobre:
  - Inventarios de emisiones disponibles.
  - Resolución temporal de los contaminantes objeto de los pronósticos (p.ej., horaria para  $PM_{2.5}$ , hora pico para  $PM_{2.5}$ , promedio de 24 horas para  $PM_{2.5}$ ).
  - Productos del modelo (p.ej., ICA, concentraciones).
  - Opciones de presentación (p.ej., escala a colores).
  - Opciones de visualización (p.ej., mapas, Google Earth, GIS).
- Opciones para convalidar el modelo utilizando niveles de  $PM_{2.5}$  obtenidos de monitores.