

GRUPOS DE TRABAJO

MODELIZACIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE

V SEMINARIO DE CALIDAD DEL AIRE EN ESPAÑA

Santander, 16, 17 y 18 de Octubre de 2006

INDICE

INTRODUCCIÓN	1
Capítulo 1. El papel de la modelización en la gestión de la calidad del aire	3
Capítulo 2. Herramientas modernas para la modelización de la calidad del aire	24
Capítulo 3. ¿Qué tipo de requerimientos deben exigirse a los modelos para cada problema o cada zona de España?	46
Capítulo 4. Inventario de modelos utilizados para calidad del aire	64
Capítulo 5. Los inventarios de emisiones para modelización	123
Consideraciones finales	137

INTRODUCCIÓN

La legislación establece que, además de las mediciones continuas y sistemáticas con estaciones de medida, pueden utilizarse otras técnicas capaces de evaluar o incluso predecir la calidad del aire. Evidentemente, la modelización matemática es una de esas herramientas. Ésta ha tenido en los últimos años un desarrollo muy importante con modelos matemáticos que han abordado la simulación de las condiciones meteorológicas y la dispersión (incluyendo transformaciones químicas) de contaminantes atmosféricos con un alto nivel de detalle e incorporando cada vez más procesos físicos y químicos, más contaminantes y mejores algoritmos matemáticos que han facilitado la resolución de las ecuaciones matemáticas. A esto hay que añadir mejoras determinantes en la capacidad de cálculo de los ordenadores, la disponibilidad de más y mejores datos meteorológicos, de emisiones, etc, así como, la potencialidad añadida de su uso conjunto con otras herramientas complementarias pero importantes como son los sistemas de información geográfica.

Sin embargo, este desarrollo en el ámbito modelístico se ha traducido en una implantación más bien modesta de estas herramientas en el campo de la gestión de la calidad del aire en España, por lo que es necesario realizar un esfuerzo de acercamiento entre la comunidad científica y técnica, los usuarios finales y los gestores de la calidad del aire. Con este fin, y promovido por el Ministerio de Medio Ambiente, se ha configurado un Grupo de Trabajo sobre Modelización de la Calidad del Aire que incluye a gestores de diferentes administraciones públicas nacionales y autonómicas, a representantes del sector privado, y a grupos de investigación y desarrollo en el ámbito de la modelización numérica de la Calidad del Aire.

Los objetivos fundamentales sobre los que este grupo trabaja son: aumentar el conocimiento sobre modelos útiles a los gestores de calidad del aire; fomentar el uso de modelos atmosféricos y de dispersión como herramienta de trabajo en calidad del aire y facilitar el acceso, a los gestores y a los usuarios finales, a la información existente sobre modelos y su uso.

Con estos objetivos, el grupo se ha planteado una serie de cuestiones iniciales:

1. ¿Qué esperan de los modelos los gestores de calidad del aire?, ¿qué pueden ofrecer los modelos?,
2. ¿Qué necesitan los modelistas para responder a las necesidades de los gestores de la calidad del aire?,

3. ¿Cuál es la fiabilidad de los modelos?, ¿qué modelos son adecuados para cada problema?,
4. ¿Cuáles son los modelos que se usan en España y en el mundo?,
5. ¿Cómo debe ser la información de inventarios de emisiones para ser utilizada por los modelos?.

Responder a estas preguntas es la misión fundamental de este grupo de trabajo y a lo largo de este documento se exponen las respuestas que han surgido después de un labor de recopilación, reflexión, puesta en común y discusión a lo largo de 6 meses incluyendo tres reuniones en CIEMAT y frecuentes debates, algunos apasionantes, y revisiones de documentos utilizando las posibilidades que da Internet. El documento se articula en cinco capítulos que se corresponden con las preguntas antes indicadas. La elaboración de estos documentos ha estado encomendada a personas concretas que aparecen con responsables en cada uno de ellos, pero en todos ha habido una contribución en mayor o menor medida de todos los miembros de este grupo de trabajo y se ha buscado reflejar el sentir general o, al menos mayoritario, respecto de cada cuestión. En algunos casos, ha habido una contribución de algún colaborador externo al grupo, lo que ha quedado reflejado donde fuera necesario.

El grupo de trabajo ha estado constituido por 14 personas con buen equilibrio (casi al 50%) entre el personal científico-técnico y el personal de las administraciones. El grupo ha estado coordinado por CIEMAT y ha contado con la participación de:

- ✉ Fernando Martín (CIEMAT) – Coordinador
- ✉ Maria Victoria Albizu Etxeberria (País Vasco)
- ✉ José María Baldasano (BSC)
- ✉ Roberto San José (Facultad de Informática UPM)
- ✉ Rafael Borge (ETSII – UPM)
- ✉ Eloy Piernagorda (IBERINCO)
- ✉ Catina March (Balears)
- ✉ Antonio Lozano (Andalucía)
- ✉ Susana Gil (Cataluña)
- ✉ José Luis Palau (CEAM-Valencia)
- ✉ Juan Carlos Casado (Murcia)
- ✉ Alvaro Pérez-Uría (Castilla-La Mancha)
- ✉ David Cartelle Fernández (Galicia)
- ✉ Alberto González (MMA)

CAPÍTULO 1

EL PAPEL DE LA MODELIZACIÓN EN LA GESTIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE

Responsables:

Eloy Piernagorda Aguilera, Iberdrola, Ingeniería y Construcción, Área de Medio Ambiente

Juan Carlos Casado Guijarro, Comunidad Autónoma de la Región de Murcia, Servicio de Vigilancia e Inspección Ambiental

Colaborador externo:

Ignacio Pantojo Titos, Iberdrola, Ingeniería y Construcción, Área de Medio Ambiente

ÍNDICE.

1. Introducción.
2. La gestión de la calidad del aire y la modelización.
3. La modelización como herramienta de ayuda a la gestión de la calidad del aire.
 - 3.1 Modelos de calidad del aire.
 - 3.2 Utilidad de los modelos en el campo de la gestión de la calidad del aire.
 - 3.3 Implantación y uso de modelos de calidad del aire.
 - 3.4 La modelización y la labor del gestor de la calidad del aire.
 - 3.5. Consideraciones generales acerca del uso de modelos.
4. Necesidades de modelización para la gestión de la calidad del aire en España.
 - 4.1 La modelización en la nueva ley de calidad del aire.
 - 4.2. Herramientas tipo de modelización aplicables.
 - 4.3. Consideraciones generales desde el punto de vista de la modelización.
5. Cuestiones finales.
6. Anexo.

1. INTRODUCCIÓN.

En el momento actual, el desarrollo económico, la identificación de nuevos problemas y la evolución de la sensibilidad y las demandas de la sociedad respecto del medio ambiente atmosférico, plantean y configuran un conjunto de escenarios en los que la modelización puede pasar de ser un elemento complementario y de apoyo, a ser una herramienta de carácter estratégico en la gestión de la calidad del aire.

Como introducción al resto de documentos elaborados por el Grupo de Trabajo sobre Modelización, creado para el V Seminario sobre Calidad del Aire en España, se intentará resumir brevemente cuáles son las principales respuestas que la modelización puede ofrecer a las necesidades actuales de los gestores de calidad del aire y cuáles pueden ser los principales beneficios que los mismos pueden obtener al incorporar la modelización como una herramienta más en su quehacer cotidiano.

En líneas generales, en este documento se intentará dar respuesta brevemente a cuestiones tales como:

- € ¿Qué esperan de los modelos los gestores de la calidad del aire?
- € ¿Qué se necesita que aporte un modelo para facilitar el trabajo de los gestores de la calidad del aire?
- € ¿Qué puede ofrecer un modelo que sea de utilidad a los gestores de la calidad del aire?

Igualmente, serán comentados ciertos temas, relacionados con el uso de este tipo de herramientas desde la perspectiva de las necesidades que, a efectos prácticos, podrían derivarse del desarrollo del marco regulador avanzado en el anteproyecto de la nueva ley de Calidad del Aire.

2. LA GESTIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE Y LA MODELIZACIÓN.

La gestión de la calidad del aire puede ser entendida como un conjunto de actividades cuya ejecución es coordinada con el objetivo genérico común de proteger o mejorar la calidad del aire en un emplazamiento o área geográfica determinada.

Las actividades de gestión de la calidad del aire requieren la existencia de un marco de referencia en el que existan mecanismos que permitan:

- 4 Identificar y efectuar un diagnóstico de posibles problemas.
- 4 Definir objetivos de calidad del aire.
- 4 Establecer normas y procedimientos de control y actuación.
- 4 Diseñar y definir estrategias de control y vigilancia y programas de actuación.

En una primera etapa, el desarrollo de las actividades relacionadas con la gestión de la calidad del aire ha estado vinculado a la necesidad de dar respuesta a problemas concretos, en su mayor parte de carácter local (zonas de alta contaminación, impacto de focos específicos, etc.). Por ello, buena parte de las actividades relacionadas con la gestión de la calidad del aire han estado muy vinculadas a los sistemas operativos de vigilancia y control de la contaminación, fundamentalmente basados en la medida de contaminantes.

Sin embargo, en las últimas décadas, la preocupación por nuevos problemas relacionados con la calidad del aire, la complejidad de los mismos, la necesidad de abordar cuestiones globales e interterritoriales o el reconocimiento de que el medio ambiente atmosférico es responsabilidad de la sociedad en su conjunto, ha facilitado que la gestión de la calidad del aire evolucione hacia nuevos enfoques.

Desde estos nuevos enfoques, la calidad del aire no es solo vista como un 'objeto pasivo' a proteger y conservar, sino también como un elemento de gestión y planificación que puede tener una incidencia directa en la vida cotidiana de los ciudadanos y en el desarrollo de la sociedad en su conjunto.

Algunos ejemplos de estos problemas pueden ser:

- € La limitación que puede suponer la calidad del aire para la construcción de nuevas instalaciones industriales y de producción de energía.

- ≠ Los problemas derivados del crecimiento de las ciudades y, en particular, del parque de vehículos.
- ≠ La influencia de las emisiones en áreas distintas a las que se produce en origen la emisión.
- ≠ La preocupación creciente por la contaminación debida a contaminantes secundarios y partículas.
- ≠ La influencia de las emisiones en el cambio climático.
- ≠ Los posibles efectos de la calidad del aire sobre la salud, los ecosistemas y los materiales.

La complejidad y la dificultad del tratamiento de los problemas que se plantean hace que los mismos no puedan ser abordados haciendo uso exclusivamente de sistemas de observación, vigilancia y control basados sólo en medidas directas. Dichos sistemas deben ser complementados con nuevas herramientas que ayuden a efectuar tales valoraciones, entre las cuales la modelización puede jugar un papel determinante.

Un ejemplo práctico reciente en nuestro país puede ser la transformación sufrida por el sector eléctrico en los últimos años, en los cuales se ha iniciado el proceso de reconversión o cierre de instalaciones antiguas y de construcción de nuevos centros de producción de energía eléctrica, que utilizan como combustible fundamentalmente el gas natural.

Desde el punto de vista de la gestión de la calidad del aire, la construcción de este tipo de instalaciones plantea, por un lado, un problema de planificación, que requiere la estimación a futuro del impacto de los nuevos focos emisores y, por otro, un problema de operación y control en tiempo real, como es la necesidad de establecer una vigilancia y un control específico que contemple, incluso, reducir emisiones en los casos en los que puedan producirse superaciones de los estándares de calidad del aire. El tratamiento, tanto de un problema, como del otro, no puede ser realizado adecuadamente sin hacer uso de técnicas de modelización.

3. LA MODELIZACIÓN COMO HERRAMIENTA DE AYUDA A LA GESTIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE.

3.1. MODELOS DE CALIDAD DEL AIRE.

Aunque existen diferentes definiciones, un modelo puede ser definido como una herramienta que intenta describir o reproducir los rasgos esenciales de un sistema, de los procesos que en él se desarrollan o de los resultados o consecuencias que de ellos se derivan.

En términos generales, la modelización es una herramienta que puede ser aplicada a todos los aspectos relacionados con la contaminación atmosférica, su origen y sus consecuencias. En particular a:

- ≠ Caracterización de emisiones.
- ≠ Transporte de contaminantes en la atmósfera.
- ≠ Transformación química y fotoquímica.
- ≠ Estimación de niveles de inmisión, depósito o exposición.
- ≠ Estimación de efectos sobre ecosistemas y materiales.
- ≠ Estudio de relaciones fuente-receptor.

Por modelo de calidad del aire, se suele entender una herramienta de cálculo que permite obtener una estimación de los niveles de inmisión, originados por las emisiones de focos emisores de contaminantes, en determinadas circunstancias, sobre un área geográfica previamente definida.

Existen diferentes tipos de modelos de calidad del aire, si bien posiblemente los de mayor difusión en el campo del medio ambiente atmosférico, son aquellos basados en una base algorítmica matemática, la cual utiliza ciertas estructuras de datos, de manera que es posible la implementación de todo ello en un programa informático.

Cuando se habla de modelización en el terreno de la gestión de la calidad del aire, por lo general, únicamente se piensa en los modelos de calidad del aire anteriormente comentados. Sin embargo, es necesario indicar que las necesidades de modelización en esta área son más amplias, abarcando todas aquellas actividades en las que puede ser necesaria la estimación de indicadores de cualquier tipo y aquellas que deben ser realizadas como paso previo a la aplicación de un modelo de calidad del aire. Algunos ejemplos de tales actividades pueden ser:

- ≠ Caracterización de la meteorología y condiciones de dispersión en un emplazamiento.
- ≠ Distribución del tráfico, como paso previo para estimar sus emisiones
- ≠ Creación de escenarios de crecimiento económico.
- ≠ Creación de escenarios de desarrollo y ordenación del territorio.
- ≠ Valoración del impacto económico de estrategias, uso de nuevas tecnologías o medidas de reducción de emisiones en general.
- ≠ Valoración económica del uso de herramientas de mercado.
- ≠ Análisis de culpabilidad y responsabilidad.
- ≠ Previsión de la evolución de los estándares de calidad del aire y de la normativa relacionada.

El desarrollo de la modelización durante las últimas décadas permite disponer hoy día de numerosas herramientas de modelización, listas para ser configuradas, personalizadas e implantadas, las cuales cubren un abanico muy amplio de problemas de contaminación atmosférica con un grado de resolución muy avanzado.

Los diferentes modelos que pueden ser de interés en las tareas de gestión de calidad del aire, así como el análisis de sus requerimientos, necesidades de datos, o la problemática que genera su uso, son tratados con mayor detalle en el resto de ponencias elaboradas en el Grupo de Trabajo sobre Modelización del presente Seminario.

3.2 UTILIDAD DE LOS MODELOS EN EL CAMPO DE LA GESTIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE.

En líneas generales, el objetivo principal del uso de los modelos es ofrecer al gestor de calidad del aire una información numérica objetiva, lo más real y precisa posible, que pueda servir como elemento de valoración, de evaluación o de soporte para la toma de decisiones, en el marco de los correspondientes planes, programas, estrategias de control y vigilancia, etc.

El uso de modelos puede ser especialmente interesante en la labor del gestor de calidad del aire para:

- ≠ Completar espacial y temporalmente el conocimiento que proporcionan los sistemas de vigilancia convencionales basados en la medida, permitiendo además la estimación de la contaminación en punto donde no exista medida en continuo.

- ≠ Prever la posible superación de límites de calidad del aire.
- ≠ Cubrir las necesidades de información a la población.
- ≠ Ayudar a estimar el grado de contribución de focos individuales a los niveles de inmisión observados en una zona.
- ≠ Examinar la influencia que diferentes focos o sectores pueden tener en diferentes escenarios futuros de desarrollo.
- ≠ Proporcionar soporte objetivo para la toma de decisiones en planes de emergencia o de intervención.
- ≠ Examinar las implicaciones y efectos que pueden tener diferentes estrategias de vigilancia y control, sobre todo en aquellos casos en los que las relaciones entre la emisión y la inmisión de los contaminantes no son evidentes, como puede ser el caso de la contaminación fotoquímica, asociada a contaminantes secundarios.
- ≠ Comprender procesos o abordar problemas en lo que intervienen diferentes escalas de transporte.
- ≠ Valorar el impacto de nuevos focos, de la modificación de los mismos o la de sus pautas de funcionamiento.
- ≠ Dar soporte para el diseño y análisis de estrategias de reducción de la contaminación atmosférica a nivel sectorial, regional o nacional así como a planes y programas
- ≠ Diseñar y optimizar sistemas de vigilancia y redes de medida.
- ≠ Realizar análisis 'forense' o de culpabilidad.
- ≠ Evaluar la calidad del aire en el interior de edificios y construcciones.
- ≠ Facilitar la realización de estudios de exposición y efectos sobre la salud y los ecosistemas.
- ≠ Analizar la interacción y efectos sinérgicos entre focos o entre distintas actividades que puedan influir en la modificación de los escenarios de emisiones.

3.3 IMPLANTACIÓN Y USO DE MODELOS DE CALIDAD DEL AIRE.

A la hora de afrontar un problema en el que la modelización pueda aportar soluciones, el gestor de calidad del aire puede optar por el desarrollo de una solución específica o por la adaptación de algunas de las herramientas existentes indicadas anteriormente.

Para ello es conveniente la realización de un análisis técnico-económico, en el que se contemple la especificidad de cada caso, atendiendo a sus necesidades particulares, las posibles alternativas, los costes y requerimientos asociados a cada una de ellas y los resultados previsibles.

En cualquier caso, el establecimiento o el uso de cualquier modelo debe suponer siempre un proceso en el que se contemple al menos:

- a. Identificación, caracterización y descripción de sistemas y/o procesos
- b. Definición y/o medición de indicadores.
- c. Establecimiento de modelos o aproximaciones conceptuales que representen el sistema o proceso.
- d. Desarrollo y escritura de la formulación algorítmica.
- e. Alternativamente, selección y configuración, en su caso, de modelos ya existentes.
- f. Validación y pruebas.
- g. Implementación y puesta en marcha operativa, si procede.
- h. Evaluación.

Una vez que un sistema de modelización puede ser dado por bueno para su aplicación, el proceso de contraste, verificación y mejora continua de los resultados del modelo, debería pasar a ser tenido en cuenta como una tarea más a realizar, dentro del ciclo que supone la simulación de la calidad del aire, o como parte de las actividades de operación y mantenimiento de los correspondientes sistemas de vigilancia.

3.4 LA MODELIZACIÓN Y LA LABOR DEL GESTOR DE LA CALIDAD DEL AIRE.

Para que los modelos sean una herramienta útil para el gestor de la calidad del aire, éste debe tener la seguridad de que los resultados de la aplicación de los mismos realmente aportan un valor añadido a su labor, ayudando además a facilitar o incluso a simplificar su trabajo.

En este sentido, a continuación se comentan algunas de las preocupaciones o requisitos que los gestores de calidad del aire consideran de mayor importancia para que un modelo sea de utilidad en su trabajo. Dichas cuestiones pueden ser clasificadas de forma sencilla en las siguientes categorías:

A. Implantación y mantenimiento.

- 4 Costes de implantación, operación y mantenimiento razonables y asumibles.
- 4 Personal técnico adecuado. La necesidad de contar con personal suficientemente cualificado para el uso, operación e interpretación de modelos suele ser indicado por los gestores como uno de los principales escollos para integrar el uso de este tipo de técnicas en su rutina. La externalización o el establecimiento de convenios con universidades, centros de investigación o empresas especializadas pueden ser alternativas al personal propio.
- 4 Facilidad de uso y mantenimiento. Los códigos deben ser preparados de manera que su inserción en las rutinas de trabajo no implique un aumento significativo de las cargas de trabajo. El coste de aprendizaje de las herramientas para los niveles de operación y mantenimiento debe ser lo más bajo posible.
- 4 Posibilidad de adaptación y personalización. Ello puede incluir la posibilidad del uso de códigos abiertos que permitan la sustitución o adaptación de algoritmos y la introducción de modificaciones, cambios o mejoras a futuro. Por código abierto, en este caso, se entiende la posibilidad de tener derecho de acceso y modificación sin problemas al código fuente de los modelos o sistemas de modelización, independientemente de que sea a través de licencias privadas o públicas.
- 4 Es deseable la existencia de un soporte técnico claramente identificable, con capacidad de respuesta rápida y segura para la resolución de problemas. Ello no siempre es posible

cuando se hace uso de códigos abiertos de licencia pública, mantenidos a través de comunidades de usuarios.

B. Requisitos técnicos adecuados

- 4 Los modelos deben proporcionar productos coherentes y asimilables al marco legal, plan o programa en el que deben ser utilizados. Por ejemplo, en el caso de aplicaciones de estimación de la calidad del aire en tiempo real, es deseable que los modelos proporcionen al menos una estimación de las concentraciones de SO₂, NO_x, O₃, PM₁₀ y CO, sobre una base temporal de promedio horaria.
- 4 Los modelos deben poder acomodar las emisiones reales y previstas, relevantes para el problema y ámbito de aplicación.
- 4 Los modelos deben aplicarse en un dominio y con una resolución adecuada a las escalas espaciales involucradas en los procesos que representan.
- 4 Los resultados de los modelos deben proporcionar al gestor de la calidad del aire una visión espacial lo más amplia posible, coherente con la extensión y cobertura de las redes de vigilancia disponibles.
- 4 La resolución espacial debe ser lo suficientemente alta como para que los resultados sean útiles de cara al gestor de la calidad del aire. Este aspecto será muy variable en función del problema analizado. Por ejemplo la simulación de procesos fotoquímicos a mesoescala puede requerir resoluciones de unos pocos kilómetros. En sistemas de vigilancia locales, es importante poder discernir entre diferentes focos, lo cuales pueden estar separados entre sí distancias inferiores a 1 Km. En problemas de microescala, la resolución adecuada puede ser del orden de metros.
- 4 Los procesos físicos y químicos descritos por los modelos deben incluir las formulaciones más adecuadas para cada aplicación. Desde el punto de vista de la optimización de esfuerzos, es deseable buscar un compromiso entre exactitud y requerimientos de información y cálculo.
- 4 Los modelos deben ser evaluados con el objeto de conocer la incertidumbre asociada a sus estimaciones en las condiciones de aplicación dadas. El error de las estimaciones que proporcionan debe estar en un rango aceptable y, según la aplicación, de acuerdo con la normativa vigente. En cualquier caso, este error debe ser cuantificado y valorado adecuadamente.

- 4 Tiempos de respuesta adecuados. Por ejemplo, para aplicaciones de vigilancia y control en tiempo real, los modelos deben ser preparados para poner la información a disposición del operador o del gestor de la calidad del aire sobre ciclos de actualización lo más reducidos que sea posible. Es deseable que los modelos proporcionen una solución en todo momento y para cualquier situación meteorológica y de dispersión atmosférica. En el caso de simulaciones a gran escala, el proceso de ejecución, post-proceso y evaluación de resultados debe ajustarse a los calendarios previstos en el proceso de toma de decisiones.
- 4 En la medida de lo posible deben existir vías de mejora de los resultados, bien sea mediante la adaptación de los códigos, mediante la evolución de los mismos o mediante la incorporación de módulos o paquetes de mejora.
- 4 Los modelos deben ser lo más versátiles posibles, en el sentido de adaptarse a la mayor cantidad posibles de fuentes de información y de adaptar sus salidas a un rango amplio de requerimientos.

C. Operación y explotación.

- 4 Los modelos o sistemas de modelización deben contar con unas interfases gráficas de usuario sencillas y eficaces, que ofrezcan tanto al operador, como al gestor la información realmente relevante para la realización de sus trabajos, de la forma lo más intuitiva y sencilla posible. En su ausencia, debe ser posible localizar y sintetizar con claridad y facilidad la información relevante de cara a la toma de decisiones.
- 4 La información que suministran los modelos debe poder ser fácilmente utilizable o exportable a sistemas de información tanto de uso restringido, como de uso público, utilizando a ser posible, las tecnologías estándar del momento (acceso dinámico en red a la información, publicación en web, etc.).
- 4 Es deseable una estandarización del uso de las herramientas de modelización a nivel nacional, de manera que se facilite el intercambio de resultados y la creación de una base de usuarios suficiente para efectuar desde una amplia experiencia, una revisión crítica de las herramientas existentes aplicables para cada problema, adaptándolas a las especificidades de cada dominio de simulación.
- 4 En este sentido, se considera conveniente el establecimiento de foros permanentes de discusión en materia de modelización y el establecimiento o definición de Centros de Referencia y Formación que asesoren, validen o certifiquen de alguna manera las

herramientas de modelización que deben ser usadas en el ámbito de la gestión de la calidad del aire.

3.5. CONSIDERACIONES GENERALES ACERCA DEL USO DE MODELOS.

El uso de las herramientas de modelización puede proporcionar notables beneficios al gestor de calidad del aire. Para ello, es conveniente garantizar una adecuada comprensión de las bases conceptuales que soportan dichas herramientas, su rango de validez o aplicación y las características de los productos que proporcionan

Algunas cuestiones de interés que merece la pena señalar son:

- ≠ Un modelo no explica la realidad completa, la intenta describir o aproximarse a ella lo más posible. Un modelo no puede describir más de lo que esté incluido en su propia base algorítmica. Incluso los modelos más sofisticados o complejos son simplificaciones del mundo real, en el sentido de que parten de una conceptualización de la realidad, de que asumen ciertas hipótesis y parametrizaciones, efectúan aproximaciones, etc.
- ≠ Los resultados de los modelos son estimaciones de variables, las cuales están afectadas por un término de error. Dependiendo del problema y del escenario en particular que se plantee, la magnitud y la importancia de dicho error tendrá un mayor o menor impacto sobre la toma de decisiones.
- ≠ Todo modelo deber ser validado o verificado de alguna manera antes de proceder a su uso para la toma de decisiones. Es importante comprender y hacer comprender que aún en un modelo validado siempre existirá un término de error, que tiene implicaciones y que debe ser tenido en cuenta y manejado con cautela.
- ≠ Independientemente de la adecuación, amplitud y exactitud de las bases físico-químicas de un modelo, sus resultados dependen invariablemente de la calidad de la información de partida (emisiones, variables meteorológicas, etc.). Existe un error asociado a los datos de partida, incluso a las observaciones contra las que se comparan los resultados. Es importante asumir la existencia de estos errores, cuya consideración e interpretación no es incompatible con una gestión eficaz y puede ayudar a mejorar los sistemas de simulación.
- ≠ Un modelo no sustituye a la medida de los contaminantes para evaluar la calidad del aire. Al igual que la medida, la modelización es una herramienta más de la que el gestor se puede valer para desarrollar su labor. Medición y modelización son de hecho herramientas complementarias que deben ser usadas conjuntamente. El uso de un modelo de forma

complementaria a la de una red de vigilancia enriquece notablemente la visión de la realidad que proporciona ésta, ya que de esta forma se complementan la precisión de las mediciones con la buena cobertura espacial y visión integral que proporcionan los modelos

- ≠ El proceso de verificación y evaluación continua de los resultados es muy importante para garantizar la utilidad de las herramientas de modelización. No es realista implantar un modelo y pensar que éste va a dar una respuesta inmediata a los problemas para los cuales se plantea su uso. Implantar un modelo supone asumir posiblemente el desarrollo de trabajos de mejora y actualización continuas, del mismo y de sus bases de datos. El uso de modelos requiere, por otro lado, la incorporación de personal especializado con capacidad para operarlos y mantenerlos correctamente.
- ≠ Sobre todo en el caso de sistemas orientados a una operación en tiempo real, la implantación y operación de modelos para su uso rutinario en la gestión de la calidad del aire, puede tener costes adicionales que deben ser convenientemente valorados antes de proceder a su implantación.
- ≠ La simulación de la calidad involucra una serie de actividades y etapas que constituyen un ciclo. No es conveniente crearse expectativas, a priori, acerca de los resultados de un modelo. Tampoco es recomendable descartar directamente su uso porque los resultados no parezcan satisfactorios en primera instancia. El uso y el mantenimiento de los modelos debería ser justificado por los beneficios derivados de su uso y no sólo por la valoración estricta del coste de su mantenimiento en términos absolutos. Existen ejemplos de desarrollos o implantaciones de modelos, cuyo uso ha sido abandonado de forma casi inmediata a su implantación, debido a problemas de falta de personal, de adecuación del mismo o al coste de operación y mantenimiento, sin haber efectuado intentos de mejora posteriores a su implantación.

4. NECESIDADES DE MODELIZACIÓN PARA LA GESTIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE EN ESPAÑA.

4.1 LA MODELIZACIÓN EN LA NUEVA LEY DE CALIDAD DEL AIRE.

En el nuevo marco regulador que supone la Ley de Calidad del Aire, la modelización puede jugar un papel muy relevante.

En líneas generales, la futura ley se inspira en los principios de prevención y cautela, corrección de la contaminación en origen y se apoya en un régimen sancionador, que recoge el principio de 'quien contamina paga'.

Dichos principios se entienden desde el planteamiento explícito de corresponsabilidad entre Administraciones, sociedad y sectores de actividad, desde un enfoque integrador de los problemas y utilizando la incentivación como un instrumento más a considerar en la gestión de la calidad del aire.

Una primera lectura del texto del anteproyecto de la nueva Ley de Calidad del Aire, indica que existen diferentes conceptos o cuestiones en el mismo cuya clarificación, definición, estimación o desarrollo operativo, en general, puede hacer necesaria o conveniente la realización de actividades de modelización.

Algunos de los conceptos o cuestiones contemplados en el texto del anteproyecto de ley, en los que el uso de la modelización puede ser una herramienta de especial utilidad son:

- ≠ Definición, desarrollo y seguimiento de planes y programas.
- ≠ Establecimiento de sistemas para la evaluación continua de planes, programas y estados de calidad del aire.
- ≠ Zonificación del territorio.
- ≠ Desarrollo del sistema nacional de evaluación, vigilancia y prevención.
- ≠ Implantación de sistemas de vigilancia en Comunidades Autónomas y Ayuntamientos, mediante redes y otros sistemas.
- ≠ Desarrollo del régimen de intervención administrativa de actividades e instalaciones, que obliga a un mantenimiento coordinado de un catálogo de actividades e instalaciones y de inventarios de emisiones.
- ≠ Asesoría en la valoración del impacto de modificaciones sustanciales de instalaciones.
- ≠ Elaboración y aplicación de planes de intervención sectoriales, zonales o individuales.
- ≠ Definición y desarrollo de políticas sectoriales, en particular, adopción de medidas individuales cuando exista amenaza inminente.

- ≠ Desarrollo, implantación y seguimiento de indicadores ambientales.
- ≠ Seguimiento y evaluación desde enfoques integradores de problemas tales como la contaminación transfronteriza, el cambio climático y la destrucción de la capa de ozono.
- ≠ Implantación o uso de mecanismos de incentivación:
 - 4 Valoración del impacto del uso de instrumentos económicos y mecanismos de mercado.
 - 4 Asesoría para el establecimiento de acuerdos voluntarios.
 - 4 Desarrollo de actividades de I+D+i.

4.2. HERRAMIENTAS TIPO DE MODELIZACIÓN APLICABLES.

Con el objeto de ofrecer una visión de conjunto, que resuma las variedad de temas en los que la modelización puede adquirir un papel relevante a la luz del anteproyecto de Ley de Calidad del Aire, las tablas del **Anexo 1** intentan resumir de forma muy simplificada las principales actividades en las que podría ser necesario el uso complementario de las técnicas de modelización, considerando las cuestiones indicadas en el apartado anterior.

En dichas tablas, se ha tratado de identificar los principales contenidos que deben ser cubiertos mediante la ejecución de las citadas tareas. Igualmente, junto a ellas se han indicado las principales herramientas tipo de modelización que podrían ser necesarias para su desarrollo.

Para facilitar su revisión las actividades han sido agrupadas en tres grandes categorías:

A: Planificación y Evaluación.

- 4 Diagnóstico e identificación de problemas.
- 4 Incorporación de metodologías, procedimientos, tecnologías, sistemas y actividades en el marco actual.
- 4 Diseño evaluación y optimización de sistemas de vigilancia e información.

B. Control y vigilancia.

- 4 Operación y mantenimiento de los sistemas de vigilancia y control.

- 4 Actividades de verificación y registro del marco actual establecido.

C. Prospección

- 4 Identificación de problemas y escenarios futuros.
- 4 Desarrollo y análisis de escenarios de emisión alternativos basados en pautas de crecimiento y consumo alternativos así como la implementación de diversas medidas de control o reducción de emisiones, como por ejemplo la aplicación de nuevas tecnologías.

4.3. CONSIDERACIONES GENERALES DESDE EL PUNTO DE VISTA DE LA MODELIZACIÓN.

Desde el punto de vista de la modelización, la revisión del texto del citado anteproyecto de ley de calidad del aire plantea diversas cuestiones de carácter práctico, entre las cuales merece la pena destacar:

- ≠ Existen tres ámbitos competenciales para el desarrollo y aplicación de planes, programas y sistemas de vigilancia, los cuales se identifican con la estructura territorial y administrativa del Estado: ámbitos nacional, autonómico-regional y local, representado por los ayuntamientos o las corporaciones locales. Dichos ámbitos se deben traducir en la creación y en el mantenimiento de cierta infraestructura (bases de datos, sistemas de vigilancia, herramientas de modelización, etc) cuyos límites de actuación y características técnicas deberían ser adecuadamente definidos y coordinados, desde el punto de vista de la modelización, con el objeto de evitar redundancias, favorecer sinergias y facilitar la realimentación de resultados entre ámbitos de actuación.
- ≠ La definición e implantación de los sistemas de supervisión de la calidad del aire a nivel estatal, autonómico y local debería ser efectuada contemplando no solo los límites territoriales administrativos, sino también desde la perspectiva de la coherencia con los procesos atmosféricos y sus escalas de transporte correspondientes. Igualmente, debería ser contemplada la conveniencia de la creación de catálogos de productos que puedan ser explotados como base para el desarrollo de sistemas alternativos y como fuente de información de referencia para diferentes sectores o actividades.
- ≠ La necesidad de extender la vigilancia y el control, hacia lugares que tradicionalmente no habían sido contemplados en la medida en continuo de la calidad del aire, posiblemente haciendo un uso complementario de medida y modelización, puede verse dificultada debido a

falta de recursos y de personal especializado, sobre todo en el ámbito local, excluyendo posiblemente las grandes ciudades y las zonas densamente pobladas.

- ≠ Es conveniente que los sistemas de información, medida y registro de la información tengan en cuenta las necesidades específicas de la modelización entre sus criterios de diseño, muy especialmente en el caso de los inventarios de emisiones.
- ≠ La variedad de herramientas disponibles y de criterios aplicables hacen conveniente que exista al menos cierto nivel de estandarización de herramientas y datos de entrada así como la armonización de criterios para el uso de modelos. El debate sobre la conveniencia de la elaboración de guías, definición de formatos de datos estándar, la selección de modelos y configuraciones de uso preferente, incluso de carácter regulador podría ser beneficioso. En este sentido, puede ser interesante la definición de Centros de Referencia y Formación que coordinen tales tareas.
- ≠ Pueden existir a corto plazo carencias de personal cualificado para incluir la modelización en la rutina de la gestión de la calidad del aire. En cualquier caso los equipos de gestión de calidad del aire deberían ser reforzados con personal formado en esta disciplina y las necesidades que esta demanda plantea deberían ser consideradas tanto en la Administración, como en la Universidad, Centros de Estudios e Investigación y en las empresas especializadas.
- ≠ En relación con lo anterior, las necesidades de modelización son cubiertas en la actualidad de forma desigual y solapada entre los actores comentados en el punto anterior. Una reflexión acerca del papel que cada parte debe jugar podría ser conveniente. Igualmente, podría ser interesante efectuar una reflexión sobre la conveniencia de la existencia de Entidades Colaboradores de la Administración en materia de modelización, de forma similar a como viene siendo habitual en otros campos tales como la medida o el control de emisiones.

5. CUESTIONES FINALES.

Las herramientas de modelización, en general, y los modelos de calidad del aire, en particular, juegan en la actualidad un papel determinante en ciertos aspectos de la gestión de la calidad del aire, sobre todo en los relativos a la evaluación del impacto ambiental de las emisiones debidos a focos emisores y a ciertas infraestructuras de nueva construcción.

Al margen de la actividad sostenida de algunos grupos de trabajo, fuera de ese ámbito en nuestro país, el uso de la modelización ha estado limitado a ciertas experiencias de implantación como herramienta complementaria de los sistemas de vigilancia convencionales y sus resultados han sido relegados a un segundo plano como herramienta de ayuda en la toma de decisiones.

Como ha sido comentado anteriormente en el texto de este documento, las demandas de la sociedad, que se plasman poco a poco en una normativa cada vez mas exigente, así como la dificultad del tratamiento de ciertos problemas, hacen que el interés y el uso de la modelización en el campo de gestión de la calidad del aire sea creciente en los próximos años.

Corresponde a la comunidad científica y técnica el conseguir desarrollar lo suficientemente este área de conocimiento, adaptando o creando modelos que cubran las necesidades nacionales en esta materia, demostrando la viabilidad y beneficios de su uso y formando personal científico y técnico que pueda atender las necesidades futuras en este campo.

Existen no obstante lagunas y carencias que deben ser adecuadamente cubiertas para que ello sea posible, tales como la necesidad de incrementar el esfuerzo en investigación y desarrollo, la ampliación y la mejora de las bases de datos públicas, la mejora del acceso a la información, etc., buena parte de las cuales serán analizadas con más detalle en el resto de ponencias elaboradas por el Grupo de Trabajo sobre Modelización, creado para el V Seminario sobre Calidad del Aire en España.

ANEXO 1.1

TABLAS

Categoría	Actividad	Principales contenidos	Herramienta tipo
Planificación y evaluación	Caracterización del territorio	Sistemas de información - Territorio - Usos y actividades - Planes de desarrollo, etc - Catálogos e inventarios - Registros asociados	Modelos de dispersión Modelos de tráfico
		Zonificación - Criterios de zonificación - Casación de planes de desarrollo y zonas	Modelos de dispersión
	Estimación de niveles existentes de emisión	Elaboración de inventarios de fuentes fijas Elaboración de inventarios de fuentes móviles	Modelos de tráfico. Modelos de emisiones
	Impacto de nuevos focos y valoración de modificaciones sustanciales	Situación preoperacional Estimación de la situación operacional	Modelos reguladores (¿)
	Planificación de infraestructuras ambientales	Diseño de sistemas de vigilancia Optimización y modificación de sist. vigilancia	Técnicas de minería de datos Modelos de tráfico Modelos de emisiones Modelos Meteorológicos Modelos de dispersión Modelos de receptores Modelos CFD
	Identificación de problemas	Formulación y contraste de hipótesis	
	Elaboración de planes preventivos	Criterios de prevención continua o Catálogo de situaciones Sistemas de identificación Definición de medidas preventivas	
	Elaboración de planes de contingencia	Identificación de situaciones Sistemas de identificación Definición de medidas preventivas Plan de contingencia	
	Negociación de planes	Escenarios sectoriales e individuales	
	Efectos sobre la salud y sobre los ecosistemas	Estudios de exposición Evaluación de impacto Definición de escenarios de reducción de emisiones Valoración del impacto técnico económico y sobre la calidad del aire de la aplicación de nuevas tecnologías	Modelos meteorológicos y de dispersión a corta, media y larga distancia. Modelos de estimación de cargas críticas Modelos de evaluación Integrada

Categoría	Actividad	Contenido	Modelización
Vigilancia y control	O&M sistema de vigilancia y predicción	Verificación de límites de emisión e inmisión Base para la aplicación de medidas legales	Sistema de Supervisión del MA Atmosférico (Modelos de predicción meteorológica y de la dispersión) Modelos estadísticos Modelos probabilísticos Técnicas de minería de datos
	Estimación de la efectividad de medidas de control sobre focos objetivo	Estimación de la efectividad de las medidas de control sobre focos/sectores objetivo Verificación de estrategias	
	Ejecución de planes	Ejecución de planes de intervención Ejecución de planes de contingencia	
	Análisis de culpabilidad	Relaciones fuente-receptor Contribución diferencial de focos Registro para análisis forense Medidas de reducción Hipótesis <i>what if</i>	Modelos de receptores Modelos de dispersión Modelización inversa Esquemas de contribución

Categoría	Actividad	Contenido	Herramientas tipo
Prospección	Estimación de condiciones futuras	Proyección de crecimiento de población, industria, transporte y territorio y economía.	Formulación de hipótesis y uso de modelos varios
	Estimación de niveles futuros de emisión	Proyección de inventarios	Modelos de emisiones. Modelos estadísticos
	Determinación de grado de mejoría para alcanzar objetivos	Comparación nivel actual y nivel futuro	Procedimientos estadísticos
	Definición y desarrollo de planes a largo plazo después de cumplir las normas u objetivos	Crecimiento de la población, economía, etc. Evolución de las tecnologías Emisiones esperadas Escenarios tipo	Análisis prospectivo Formulación de hipótesis y uso de modelos varios
	Instrumentos económico y nuevas tecnologías	Impacto de aplicación de instrumentos	Modelos económicos Procedimientos estadísticos Modelos de evaluación Integrada
	Problemas globales e interterritoriales	Cambio climático Contaminación transfronteriza	Modelos climáticos Modelos de transporte a larga distancia

CAPITULO 2

HERRAMIENTAS MODERNAS PARA LA MODELIZACIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE

Responsable:

Roberto San José, Facultad de Informática, UPM

Índice

- 1 Introducción
- 2 Los Modelos de Calidad del Aire
 - 2.1 Modelización de contaminantes primarios y secundarios
 - 2.2 Modelización de Aerosoles
 - 2.3 El anidamiento en los modelos de calidad del aire
 - 2.4 Asimilación de los datos de las redes meteorológicas y de calidad del aire
3. Escalas que afectan a los procesos mas frecuentes en la Península Ibérica
 - 3.1 Escalas de los procesos atmosféricos
 - 3.2 Procesos meteorológicos e interacciones entre escalas
- 4 Información a suministrar a los modelos
 - 4.1 Información meteorológica
 - 4.2 Emisiones
 - 4.3 Usos del suelo y topografía
- 5 Comunicación con los responsables de la administración para detectar sus necesidades
 - 5.1 Representatividad de los datos de las estaciones de calidad del aire y del dato en si mismo.
- 6 Conclusiones
- 7 Bibliografía

1. INTRODUCCIÓN

Existen un número importante de herramientas para la modelización de la calidad del aire. Estas herramientas generalmente se denominan modelos o sistemas de modelos de calidad del aire. La evolución de los modelos de calidad del aire ha sido importante a lo largo de los últimos 10 años. Desde el comienzo de los años 70 donde se desarrollaron modelos fundamentalmente de tipo Gaussiano hasta la actualidad el progreso y la evolución de las herramientas para la modelización de la calidad del aire ha sido constante e importante.

Como sabemos los modelos de tipo Gaussiano son modelos donde explícitamente adoptamos una solución de la ecuación diferencial de transporte que ha sido simplificada de forma notable hasta conseguir que la solución de dicha ecuación sea de tipo explícito y directo. Esta aproximación tiene la enorme ventaja de permitir una simulación a lo largo de largos periodos de tiempo con unos tiempos de computación – de acuerdo a la potencia de las plataformas computacionales actuales – muy reducidos o al menos, aceptables. Hacia mediados de los años 80, Pielke comienza la implementación en plataformas de trabajo, de modelos basados en la solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes. En la practica esto supone que la simplificación que se había efectuado previamente hasta llegar a una ecuación (o sistema) resoluble de forma explícita, se abandona, procediendo a un menor grado de simplificación de las ecuaciones originales pero a cambio se deben aplicar métodos numéricos. Este procedimiento asegura un grado mayor de precisión, aunque los métodos numéricos – necesariamente aproximaciones – requieren una mayor capacidad y potencia por parte de las plataformas computacionales.

Debido al enorme progreso de la capacidad de cálculo a lo largo de los últimos 30 años, el desarrollo de los modelos de calidad del aire ha venido parcialmente desarrollándose al compás de dicho incremento en la capacidad de computación. Los modelos de calidad del aire se han desarrollado en paralelo a los modelos meteorológicos sobre todo en los últimos años aunque inicialmente tuvieron un desarrollo anterior esencialmente debido a la necesidad de predecir el tiempo atmosférico. Por otro lado los modelos meteorológicos se han ido progresivamente adaptando a los modelos de calidad del aire parcialmente construyendo determinados módulos que adapten la información meteorológica a la información requerida como entrada para los modelos de calidad del aire (parámetros turbulentos, energía cinética, altura de la capa de mezcla, altura de rugosidad, etc.). El modelo meteorológico proporciona toda la información relativa a las

variables meteorológicas y características físicas de la Capa Límite Atmosférica que son necesarias para poder ejecutar un modelo de transporte (dispersión) que permita la simulación de contaminantes (especies que son transportadas por la dinámica atmosférica descrita por el modelo meteorológico). En este sentido, toda herramienta de dispersión que no reciba información meteorológica procedente de un modelo de calidad, confiable, robusto y eficiente, puede asegurarse que no obtendrá buenos resultados. Así, toda predicción o simulación con un modelo de dispersión requiere un excelente modelo meteorológico que proporcione dicha información.

Existen diferentes modelos meteorológicos que permiten proporcionar información de entrada a los modelos de dispersión. Esencialmente disponemos de los modelos meteorológicos de diagnóstico y de pronóstico. Los modelos de diagnóstico permiten obtener una “foto” sobre un dominio tridimensional de las variables meteorológicas en cuestión. Un ejemplo de modelo meteorológico de diagnóstico es CALMET. Este modelo permite, mediante el uso de información meteorológica procedente de estaciones en superficie o sondeos meteorológicos (además de la topografía del terreno), obtener las diferentes variables meteorológicas en todo el dominio 3D en ese instante determinado. Los modelos de pronósticos permiten el cálculo de dichas variables meteorológicas a lo largo de un periodo de tiempo específico (días, semanas, meses, etc.). Los modelos meteorológicos pueden ser globales, de mesoescala, y de microescala. Un ejemplo importante de modelo de mesoescala es el MM5 (PSU/NCAR) que está siendo progresivamente sustituido por el WRF (NCAR) aunque existen muchos otros modelos como el ECMWF (global y mesoescala), HIRLAM, RSM, etc.

Los modelos de dispersión de tipo Lagrangiano calculan trayectorias de un gran número de partículas que han sido emitidas de una o varias fuentes. Las ventajas de los modelos Lagrangianos se centran en que no existe difusión numérica artificial y por consiguiente son adecuados para describir el impacto de fuentes puntuales en el entorno de la fuente – en los modelos Eulerianos la emisión se distribuye instantáneamente en la celdilla – y la descripción de la turbulencia es de calidad similar a la de las simulaciones de grandes vórtices o eddies (LES). En experimentos realizados por el CIEMAT con modelos CFD, se ha visto que los cierres clásicos K-E se aproximan bastante a los resultados LES. Sin embargo, todas las mejoras LES se pierden cuando se consideran las incertidumbres inherentes a la variabilidad de las condiciones de contorno en atmósfera real. Es decir, con experimentos de túnel de viento la mejora es detectable, pero en una calle real esa mejoría no parece tan clara. Pueden ser apropiados para las simulaciones de accidentes en centrales nucleares y otros casos de emergencias. La química es difícil de implementar y no hay prácticamente intentos de ello por lo que no son adecuados para la

simulación de contaminantes reactivos o secundarios como el NO, NO₂ y O₃. Un ejemplo del mismo es FLEXPART.

Los modelos de dispersión de tipo Euleriano son quizás los más apropiados para las simulaciones sobre entornos urbanos o regionales y para obtener las concentraciones de contaminantes primarios y secundarios tanto reactivos como no reactivos. Los modelos Eulerianos suponen el cálculo de la dispersión de contaminantes en un entorno 3D de ejes fijos y relativo a los mismos proporcionaremos las concentraciones correspondientes. Permiten la incorporación de química atmosférica con diferentes grados de precisión. Ejemplos de los mismos son: UAM-V, CAMx, CHIMERE, EURAD o CMAQ.

2. LOS MODELOS DE CALIDAD DEL AIRE

2.1 MODELIZACIÓN DE CONTAMINANTES PRIMARIOS Y SECUNDARIOS

Los contaminantes primarios son aquellos que son emitidos directamente por las fuentes antropogénicas o naturales y los contaminantes secundarios son aquellos que se producen como consecuencia de reacciones químicas en la atmósfera a lo largo de su transporte hasta su deposición. Ejemplo de contaminantes primarios son los óxidos de nitrógeno y azufre, NO y NO₂, SO₂, partículas, PM, etc. mientras que ejemplos de contaminantes secundarios son el ozono, O₃ y el PAN (peroxiacetilnitrilo). Es importante subrayar que la mayor parte de los contaminantes primarios sufren transformaciones a lo largo de su transporte como consecuencia, tanto de reacciones químicas multifase, como específicamente de reacciones fotoquímicas por lo que en casi todos los casos se debería utilizar una herramienta que tenga en cuenta las reacciones químicas que tienen lugar en la atmósfera considerando las condiciones de presión, temperatura y eventualmente la radiación solar activa foto-sintéticamente.

2.2 MODELIZACIÓN DE AEROSOL

Los aerosoles en los modelos de calidad del aire suponen un área de especial importancia no solo debido a su enorme complejidad sino a su indudable y creciente impacto en la salud de los seres humanos. La representación matemática para incorporar en la modelización debe ser numéricamente eficiente para minimizar el tiempo de computación. La representación debe ser apropiada para entornos urbanos y regionales. Existen esencialmente dos métodos que cumplen

con las consideraciones anteriores. El primer procedimiento consistiría en modelizar el comportamiento de las partículas en conjuntos de cestas o “bins” de tamaño creciente. La segunda aproximación es modelizar las partículas como superposición de subdistribuciones de diámetro de tipo lognormal denominados “modos”. En el primer caso si utilizamos cestas de tamaños discretas, necesitamos un número considerable de bins para captar la distribución de tamaños. Si deseáramos modelizar varios compuestos entonces el número de componentes multiplicado por el número de bins conduciría a un importante número de variables que deberíamos incorporar en nuestros modelos de calidad del aire. La aproximación modal se utiliza más comúnmente en los modelos, y consiste en utilizar tres modos. De esta forma con tres propiedades es suficiente para caracterizar cada modo, a saber: a) la concentración del número de partículas; b) la concentración de área de la superficie total y c) la concentración de la masa total. Inicialmente las partículas las dividimos en finas y gruesas. Las partículas finas se producen como resultado de procesos de combustión y producción de tipo químico que condensan sobre partículas ya existentes y forman nuevas partículas por nucleación.

El grupo de partículas gruesas se compone de material como polvo (levantado por el viento) y partículas de origen marino (sal marina). La parte antropogénica de las partículas gruesas se identifica normalmente con procesos de tipo industrial. Las partículas $PM_{2.5}$ indican diámetros inferiores a $2.5 \mu m$ y PM_{10} indican partículas con diámetros inferiores a $10 \mu m$, así la masa de las partículas gruesas es la diferencia entre las masas entre PM_{10} y $PM_{2.5}$. El grupo de partículas finas, conceptualmente, se divide en partículas más pequeñas (Aitken) – que representan uno de los tres modos, el modo-i y son partículas jóvenes producidas por nucleación o por emisión directa – y en partículas más grandes (acumulación) - que representan el modo-j y son partículas añejas - . Las emisiones primarias se pueden distribuir en estos dos modos. Las partículas entre estos dos modos interactúan fuertemente mediante coagulación. El tercer modo o modo grueso incluye las partículas de origen marino o levantadas por el viento. (Byun et al., 1998; San José et al., 2004, 2005, 2006)

2.3 EL ANIDAMIENTO EN LOS MODELOS DE CALIDAD DEL AIRE

Como no es posible ejecutar modelos de tipo Euleriano tridimensional con resolución espaciales (tamaño de las celdas) altas o muy altas (1 – 3 km) sobre grandes dominios (1000 – 10000 km) debido a la elevada carga computacional – salvo utilizando superordenadores -, el procedimiento de incluir dominios con resolución espacial media o baja (9 km – 27 km) para grandes extensiones

e incorporar dominios de alta resolución en su interior para extensiones más pequeñas (anidamiento) permite simular áreas con elevada resolución espacial con costes computacionales racionales. Para efectuar dicho anidamiento es necesario proceder a interpolar los campos desde los dominios exteriores hacia los interiores. Estas interpolaciones introducen elementos “no numéricos” o espúreos (en el sentido de que las interpolaciones deberíamos evitarlas siempre que fuera posible) en el sistema de forma que si el número de las mismas es elevado podría producir efectos contrarios a los buscados. Por otro lado, los anidamientos deben tener el mismo número de capas verticales que las del dominio madre (EPA recomienda para el dominio madre más de 20 capas en altura, de hecho 32 capas) y además el modelo meteorológico y químico deben tener el mismo número de capas verticales igualmente para evitar las interpolaciones y ser consistente con los procedimientos numéricos.

2.4 ASIMILACIÓN DE LOS DATOS DE LAS REDES METEOROLÓGICAS Y DE CALIDAD DEL AIRE.

Los modelos de pronóstico pueden beneficiarse de datos meteorológicos locales mediante el denominado proceso de asimilación de la información meteorológica observada. Existen varias formas de llevar a cabo este proceso. Un método muy común que se conoce como “nudging” o “forzamiento” es aquel en que la solución del modelo de pronóstico se “fuerza” hacia las observaciones durante la ejecución del modelo. En el mejor de los casos, la solución del modelo es buena inicialmente y el “forzado” será pequeño. El Nudging puede tener efectos muy positivos en la solución final del modelo, especialmente en ejecuciones largas, pero debe utilizarse con precaución. Por ejemplo, los datos meteorológicos locales utilizados en el modelo de pronóstico deben ser representativos de la meteorología observada a las escalas que es capaz de resolver el modelo meteorológico de pronóstico. Si los datos observados están en un entorno de topografía compleja que no es resuelta por el modelo de pronóstico entonces estos datos no pueden utilizarse como asimilación para nuestro modelo. Existen esencialmente dos técnicas importantes de asimilación de datos meteorológicos, a saber: 3DVAR y 4DVAR. La técnica de 3DVAR básicamente consiste en producir una estimación “óptima” del estado de la atmósfera en el momento del análisis mediante una solución iterativa de la función coste. Como es sabido, la función coste incorpora los valores observados y modelizados así como sus incertidumbres respectivas y minimiza las diferencias. Esta solución representa la estimación de la máxima probabilidad (varianza mínima) *a posteriori* del verdadero estado de la atmósfera teniendo en cuenta dos fuentes de datos *a priori*: el dato de *background* y las observaciones. La técnica del

4DVAR representa la reinicialización del sistema desde un conjunto de datos de partida diferentes de forma que en el instante t los datos y las observaciones converjan. Esta última técnica sigue siendo muy costosa computacionalmente y todavía tiene una aplicación limitada. De forma similar podremos asimilar observaciones correspondientes a las redes de calidad del aire (escalares) en los modelos de dispersión. Esta técnica está en plena fase de investigación.

3. ESCALAS QUE AFECTAN A LOS PROCESOS MAS FRECUENTES EN LA PENÍNSULA IBÉRICA

3.1 ESCALAS DE LOS PROCESOS ATMOSFÉRICOS

Los procesos atmosféricos que determinan la meteorología y la dispersión atmosférica de contaminantes tradicionalmente se suelen clasificar atendiendo a su escala espacial (o temporal) característica. Orlanski (1975) recomienda distinguir entre las siguientes escalas:

- ≠ Macroescala (escala espacial característica superior a 1000 km). En esta escala, el flujo atmosférico está asociado fundamentalmente a las inhomogeneidades del balance energético superficial a gran escala. En el ámbito de estas escalas, la aproximación hidroestática es asumible como válida.
- ≠ Mesoescala (escala espacial característica entre 1 y 1000 km). Las características del flujo atmosférico en esta escala están determinadas por efectos hidrodinámicos (por ejemplo, canalizaciones, efectos de rugosidad, etc.) y por inhomogeneidades del balance energético superficial (fundamentalmente debidas a las variaciones espaciales de características como el tipo de usos del suelo, la vegetación, la disponibilidad de agua, etc.; y también de la orientación del terreno, la pendiente, etc.). Desde el punto de vista de la contaminación atmosférica, los efectos térmicos son los más relevantes; dado que éstos son de especial importancia en situaciones de débil forzamiento sinóptico (es decir, con malas condiciones de ventilación). Los modelos meteorológicos mesoescalares deben ser capaces de reproducir las circulaciones locales, como por ejemplo las circulaciones de brisa.
- ≠ Microescala (escala espacial característica por debajo de 1 km). En esta escala, el flujo del aire está fuertemente determinado por características superficiales del tipo: geometría de los edificios, su orientación respecto a la dirección promedio del viento, etc. En la

generación de los flujos de viento intervienen tanto los efectos térmicos como los efectos hidrodinámicos (canalizaciones, efectos de rugosidad, etc.).

3.2 PROCESOS METEOROLÓGICOS E INTERACCIONES ENTRE ESCALAS

A escala sinóptica, los patrones dinámicos del viento están relacionados con el balance energético global (Iribarne, J.V. y Cho, H.R.; 1980) y son generalmente independientes de las características orográficas locales. No obstante, a escalas menores, la circulación general sufre "perturbaciones" que están directa y fuertemente determinadas por la orografía y demás peculiaridades locales (y regionales). La cuenca mediterránea presenta una fuerte variabilidad interanual del clima, determinada por la interacción entre la circulación general y el sistema semipermanente de altas presiones noratlánticas; es decir, por la influencia predominante de las borrascas polares durante el invierno y, durante el verano, por la zona subsidente de la circulación de Hadley¹ (cinturón de altas presiones subtropicales) (Bolle, 2003) y el establecimiento de recirculaciones persistentes (Millán, 2002).

Durante la época estival, la cuenca mediterránea está más desacoplada de la circulación zonal (sinóptica) que durante el resto del año. Durante estos meses, los procesos atmosféricos a lo largo y ancho de la cuenca mediterránea están dominados por dos grandes sistemas atmosféricos semi-permanentes, localizados a cada lado de la cuenca: el anticiclón de las Azores al Oeste, y el sistema Monzónico sobre el Este mediterráneo y todo el Suroeste asiático. Como resultado de esta configuración isobárica, se pueden desarrollar diferencias de presión de hasta 30-40 hPa entre la costa Atlántica, al Oeste de Portugal, y la península Arábiga (Met. Office, 1962). En la época estival, las borrascas polares migran con los vientos del Oeste en latitudes al Norte de los Alpes, correlativamente al cinturón de altas presiones subtropicales, y muy raramente afectan a la cuenca mediterránea. Por el contrario, la dinámica atmosférica está fuertemente determinada por los gradientes de temperatura entre el mar y la tierra. Los efectos topográficos adquieren especial relevancia, interactuando fuertemente con los, habitualmente, débiles flujos generales (generados por los sistemas béricos de escalas mayores), (Millán, 1992).

Durante el invierno, la franja costera mediterránea de la Península Ibérica permanece bajo la influencia de la circulación templada, con el régimen típico de las circulaciones zonales y de las perturbaciones del oeste, relacionadas con el frente polar y guiadas por una rama meridional del

¹ La circulación de Hadley consiste en la elevación de aire húmedo cerca del ecuador y el descenso, como aire muy seco, entorno a los 30° de latitud (tras condensar el vapor de agua en la conocida como zona de convergencia intertropical).

chorro polar. En consecuencia, las masas de aire que afectan esta área tienen su origen, en general, en latitudes medias; y se trata, fundamentalmente, de masas polares marítimas (Martín, 1987).

Por tanto dos tipos de movimientos o circulaciones sinópticas bien diferenciadas, y organizadas, afectan al área mediterránea de la Península Ibérica; predominando la una o la otra según la época del año: la circulación subtropical durante el verano, y la circulación templada durante el invierno. Se ha de matizar que el establecimiento de flujos del oeste, durante los meses de invierno se interrumpe muchas veces a causa de invasiones de procedencia subtropical y, especialmente, por advecciones septentrionales, que aportan masas de aire árticas (marítimas y continentales), o masas de aire polares continentales, causadas por situaciones de bloqueo provocadas por el anticiclón continental europeo (Martín, 1987, citando a Raso, 1978). En relación con la circulación subtropical, se ha de precisar que su cinturón de altas presiones, que aparece bien definido en altura y que dificulta los movimientos ascendentes en la troposfera media y alta, no se suele observar en la superficie de la Península Ibérica. En las capas bajas, el calentamiento solar intenso provoca la formación de bajas presiones relativas (Baja Térmica Ibérica, BTI) que, potenciadas con un bajo gradiente barométrico a escala sinóptica, generan intensas circulaciones mesoescalares de periodicidad diurna que dificultan los procesos de ventilación (o limpieza) de la atmósfera (Millán, 1992; Millán, 2002).

En los estratos más superficiales de la atmósfera (capa límite), las circulaciones sinópticas se ven fuertemente perturbadas por la topografía, alineándose los flujos zonales según los ejes de cordilleras y valles. El flujo atmosférico, una vez desarrolla la BTI, queda determinado por una combinación de diversos sistemas circulatorios de origen térmico, que se acoplan en un sistema circulatorio organizado (a escala peninsular) durante el día (Millán, 1992). La cuenca occidental mediterránea está rodeada de montañas de 1500 metros o más. Sus laderas orientadas mayoritariamente hacia el Este y el Sur favorecen la formación de vientos de ladera que refuerzan las brisas de mar, y actúan como "chimeneas" orográficas que conectan los vientos en superficie con los flujos de retorno en altura. De este modo, desde un punto de vista de la contaminación atmosférica, las masas de aire recirculan sobre las zonas litorales, inhibiéndose la ventilación de las mismas (Gangoiti et al., 2001; Millán, 2002; Palau 2005). En muchos casos, los ejes de las cordilleras y los valles, actúan como verdaderos "canales" que encauzan y reorientan el régimen general de las capas atmosféricas más elevadas. Dos ejemplos de estos "cauces" naturales son el Sistema Ibérico, tal y como apuntaba Capel Molina (1981), y el valle del Ebro, tal y como puso de manifiesto Palau (2003) a partir tanto de la información meteorológica disponible en superficie,

como la obtenida en altura empleando como trazador de oportunidad de las circulaciones en las capas superiores de la capa límite, los registros sistemáticos, efectuados durante cinco años, del penacho caliente de SO₂ emitido desde la chimenea de 343 metros de altura de la Central Térmica de Andorra (Teruel).

Las escalas que afectan en mayor medida a los procesos de dispersión de contaminantes atmosféricos en la península Ibérica son esencialmente de tipo mesoescalar (ζ y η), aunque los efectos locales (mesoescala ν) son también muy importantes. Desde el punto de vista meteorológico podemos identificar 5 tipos donde las condiciones de ventilación y dispersión de contaminantes son reducidas y por lo tanto conducen generalmente (pero no siempre) a elevadas concentraciones de contaminantes en entornos urbanos y regionales:

- ≠ Masa de aire continental polar con condiciones de ventilación reducidas durante la noche y presencia de inversiones térmicas en superficie. Durante el día las condiciones de ventilación mejoran ligeramente debido al calentamiento del suelo por irradiación. Subsistencia hacia el Oeste y mayor convección hacia el Este.
- ≠ Situación Anticiclónica con apenas renovación de las masas de aire que permanecen durante un número importante de días junto al suelo. En invierno se producen fuertes inversiones térmicas nocturnas. En verano se forma una depresión de origen térmico durante el día en el interior de la península Ibérica y se producen importantes procesos de convección con ascenso de aire limitados por la subsidencia del anticiclón de las Azores. Importación de material desde Portugal y Norte de África.
- ≠ Aire marítimo polar / Atlántico templado con probable importación de material desde Portugal, Inglaterra y Centro Europa debido a la vorticidad ciclónica dominante y exportación de materiales hacia el Mediterráneo y Sureste de Europa. Las condiciones de ventilación son pobres delante del frente cálido y particularmente para las emisiones en superficie situadas bajo la inversión frontal.
- ≠ Baja Térmica Estival. Esencialmente es una burbuja de aire caliente en la baja troposfera rodeada generalmente por condiciones atmosféricas de tipo anticiclónico en la troposfera media y superior. Se trata de un escenario de elevada frecuencia y persistencia desde finales de la primavera hasta principios del otoño. Exhibe un ciclo diario acusado y dispone de recirculaciones de masas de aire a nivel peninsular e interacciones con circulaciones

locales (p.e. brisas marinas) y regionales. La presencia de corrientes convectivas no locales y subsidentes produce un ascenso y descenso continuo de los contaminantes.

≠ Anticiclón Mediterráneo-Europeo. Aportaciones de masas de aire subtropicales-continenciales (del Norte de África) a diversos niveles. Masas de aire muy secas y con gran aportación de polvo sahariano. Mala visibilidad y niveles altos de partículas atmosféricas.

Es importante destacar que no siempre las mayores concentraciones de contaminantes son identificadas claramente con escenarios meteorológicos como los descritos, por ello, con los modernos modelos numéricos meteorológicos, al tener estos en cuenta algunos de los procesos eventualmente producidos en la troposfera como consecuencia de la dinámica y la parametrización de los mismos, existe una progresiva tendencia a utilizar , conjuntamente con medidas experimentales, herramientas de modelos meteorológicos pues estos permiten determinar de forma efectiva – junto con un modelo de dispersión – las concentraciones elevadas en determinados puntos y momentos que son consecuencia del efecto integral de los procesos descritos anteriormente.

Por otro lado, las circulaciones secundarias, la parametrización de la difusión bajo condiciones de gran estabilidad y los efectos de la “urban Canopy” – en particular en entornos de topografía compleja - son áreas de intensa investigación y los modelos deben evolucionar continuamente hacia la integración de estos elementos de forma más precisa que en la actualidad.

No obstante, es importante tener siempre presente que para poder configurar el/los modelo/s de manera que puedan resolver al máximo los procesos meteorológicos que rigen la dinámica, el transporte y la química de los contaminantes atmosféricos en la troposfera, primero hay que identificar y caracterizar dichos procesos experimentalmente.

Gran parte de las aproximaciones meteorológicas utilizadas hoy en día en los modelos de calidad del aire no consideran la importancia que tienen, no solo las escalas pequeñas, sino la interacción y el efecto sinérgico entre las diferentes escalas meteorológicas en el pronóstico de la calidad del aire. Recientes estudios han puesto de manifiesto que en el entorno Mediterráneo de la Península Ibérica, pueden existir diferencias de 1300 metros en la simulación de la altura de la capa límite durante las horas centrales del día (con el consecuente impacto en la simulación de las concentraciones de contaminantes simuladas en las capas troposféricas más bajas) dependiendo

de si se resuelven adecuadamente o no los procesos meteorológicos clave que determinan el transporte y dispersión de contaminantes (Palau et al. 2005).

Validaciones estadísticas (empleando datos experimentales) de simulaciones de diferentes modelos meteorológicos, efectuadas en el marco de un reciente proyecto europeo de investigación (FUMPAPEX, 2005), han permitido identificar desviaciones en los mismos que pudieran afectar a una posterior simulación de la calidad del aire. La tipología de estas desviaciones se mostró altamente dependiente de las características climáticas de los lugares de aplicación. Así, mientras en emplazamientos urbanos del norte de Europa la problemática identificada se centra en la adecuada parametrización de procesos de carácter local, en aquellos localizados al Sur de Europa se verifica la importancia de una adecuada simulación de los procesos de mesoescala en la simulación de la calidad del aire. Este hecho es relevante puesto que supone que la aplicación de la modelización en la evaluación de la contaminación que establecen las directivas europeas, ha de seguir una metodología necesariamente coherente con las características climáticas de cada región y, en cada caso, con los diferentes procesos meteorológicos clave (y, por consiguiente, considerando sus interacciones y retroalimentaciones entre las diferentes escalas espacio-temporales).

En definitiva, hay que seguir investigando en los procesos asociados a los episodios de contaminación a diversas escalas, aunque a escala sinóptica sean bastante conocidos. Quedan no obstante, lagunas en la interacción entre las diferentes escalas y en el transporte a larga distancia.

4. INFORMACIÓN A SUMINISTRAR A LOS MODELOS.

4.1 INFORMACIÓN METEOROLÓGICA.

Los modelos de calidad del aire requieren de una información meteorológica robusta, precisa y fiable. En la medida en que nuestro modelo de dispersión y fotoquímica es más complejo, la información meteorológica necesaria es, a su vez, compleja y detallada. Los modelos modernos de tipo Euleriano requieren una información meteorológica acorde con las características de estos modelos. Así, como se describe en el documento EPA-454/R-05-002 de octubre del 2005 y publicado por EPA en noviembre del 2006, las características de los modelos meteorológicos a utilizar en las aplicaciones de modelos de dispersión serán de características similares a las

utilizadas en dicho modelo de dispersión. Así, por ejemplo el número de capas verticales serán alrededor de 30 y este número será igual al utilizado en el modelo de dispersión acoplado.

Por otro lado la información meteorológica debe estar de acuerdo con el tipo de aplicación del modelo fotoquímico o estudio de calidad del aire que se vaya a efectuar. Así, para estudios de impacto en la calidad del aire, de acuerdo con dicho documento EPA mencionado, puede ser interesante caracterizar una serie de episodios de acuerdo con las observaciones proporcionadas por la red de calidad del aire y posteriormente clasificar dichos episodios en función de diferentes escenarios meteorológicos.

En definitiva, e independientemente de que la información meteorológica se utilice en modelos de diagnóstico o pronóstico, el ejemplo de la *Environmental Protection Agency* de EE.UU (EPA), puede servir como referencia al caso español. La identificación de las necesidades de información meteorológica para cada tipo de estudio en función de sus necesidades (variables requeridas así como su resolución espacial y temporal) es un aspecto importante. Aún más, proporcionar indicaciones sobre los datos a utilizar en cada caso, e incluso su suministro, facilitaría la aplicación de las técnicas de simulación de la calidad del aire, así como la posterior valoración e interpretación de los resultados. En la actualidad, existen muy diversas fuentes de información meteorológica, pero no hay ningún tipo de normalización para su obtención y uso. Es por tanto, deseable que por un lado, se establezcan pautas respecto a los requerimientos de información de los distintos tipos de modelos y se mejore la accesibilidad a los mismos por parte de la comunidad científica, administraciones y empresas. Algunos de los ámbitos y aplicaciones concretas relacionadas con estos aspectos podrían ser:

- estandarización del acceso y procesado de las observaciones de estaciones meteorológicas del Instituto Nacional de Meteorología (en superficie y en altura), tanto para su integración en técnicas de asimilación de datos, como para alimentar a modelos de diagnóstico de escala local
- facilitar el acceso a integraciones numéricas de modelos de pronóstico y reanálisis atmosféricos (HIRLAM, ECMWF)
- establecer las pautas para el desarrollo y explotación de datos de mediciones in-situ para elaboración de estudios de impacto ambiental u otras aplicaciones prácticas

4.2 EMISIONES

En esencia, la simulación de la calidad del aire responde a la resolución de un balance de materia que parte de las emisiones y que considerando los distintos procesos de transporte y reacción en la atmósfera, llega a unos determinados niveles de inmisión. De este modo, la calidad de la información de partida sobre emisiones es fundamental para obtener resultados válidos. Las emisiones a proporcionar a los modelos de calidad del aire deberán caracterizar convenientemente en tiempo y espacio los diferentes contaminantes primarios emitidos. Así, para el caso de los modelos Eulerianos, estas emisiones consistirán en la cantidad de contaminante por unidad de área y unidad de tiempo emitido. En el caso de los compuestos orgánicos volátiles es deseable caracterizar dichas emisiones en función de determinados grupos o especies representativas de los mismos, puesto que existen notables diferencias en cuanto a su reactividad y capacidad de producir contaminantes secundarios.

Es importante hacer notar que las emisiones de cada contaminante disgregadas por tipo de fuente son absolutamente necesarias para posteriormente poder llevar a cabo estudios sobre la importancia relativa de las concentraciones obtenidas por nuestro modelo respecto a las fuentes emisoras. Nuestro inventario – o quizás dicho de forma más precisa, nuestro “modelo de emisiones” – deberá incluir las emisiones por tipo de fuente emisora. Las emisiones biogénicas son fundamentales en todos los casos pero especialmente en los estudios de contaminantes secundarios como el ozono donde las emisiones procedentes de diferentes tipos de árboles como pinos, robles, etc. contribuyen muy sustancialmente con diferentes tipos de terpenos como los monoterpenos e isoprenos que son compuestos activos para la formación del ozono, contribuyendo muy significativamente al mismo en aquellas latitudes con elevada radiación solar.

Existe una cuestión importante en la que hay que profundizar y es la necesidad de un inventario nacional y varios regionales (compatibles entre sí) de emisiones fácilmente actualizable, que incluya más contaminantes (p.e. partículas de origen natural), mejor resolución espacial y temporal.

Creo que esto es una necesidad muy importante y clara en España. Está claro que hay grupos que están trabajando en esto y que debe mantenerse y mejorarse. Aunque no debemos olvidar que un “inventario” de emisiones en realidad es un modelo en muchos aspectos y la validación es muy difícil. La utilización de modelos con técnicas de modelización inversa, es decir, utilizando el cálculo variacional en los modelos numéricos puedan “ir hacia atrás” y dadas determinadas

observaciones estimar las emisiones que darían lugar a las mismas, siendo estas las emisiones “óptimas”. Diferentes grupos, principalmente en Alemania, están trabajando en esta línea desde hace algunos años.

Finalmente, debemos señalar la importancia de establecer buenos modelos de emisiones en modo predictivo. En los sistemas de modelización de la calidad del aire que se construyen para ser utilizados en modo predictivo, es fundamental – además de otros elementos importantes como las condiciones de contorno e iniciales, la asimilación de datos medidos durante el periodo “histórico” del modelo, etc. – elaborar un adecuado modelo de emisiones predictivo. Es decir, en la fase predictiva de un sistema de este tipo, las emisiones de cada hora y celdilla “futura” se corresponderán con unas emisiones estimadas del “futuro”. En este sentido, por ejemplo, en un sistema urbano y regional, las emisiones industriales (grandes fuentes industriales eventualmente) deberán incorporar las previsiones de emisión de estas industrias ubicadas en nuestro dominio a modelizar. En la mayoría de los casos, estas emisiones se corresponden con las políticas y estrategias de producción de la empresa – limitadas también por la tecnología y los productos industriales que obtienen – correspondiente y las emisiones están totalmente vinculadas a esos parámetros. Es necesario por tanto que las industrias – en particular las grandes y medianas con consumos eléctricos superiores a los 50 MW de acuerdo al registro de emisiones EPER – provean informáticamente de esta información al modelizador en modo diario o semanal con la posibilidad de efectuar cambios casi en tiempo real. Existen algunos ejemplos en España donde estas experiencias ya se están realizando e incluso están operativas que se corresponden con Centrales de Ciclo Combinado y producción cementera. La realización de este modelo “predictivo” de emisiones para fuentes industriales corresponderá de forma efectiva a las industrias de referencia.

Otros elementos importantes del sistema “predictivo” de emisiones se refieren a la inclusión de la temperatura “futura” – producida por el modelo meteorológico – en la inclusión del cálculo de las emisiones en frío de los vehículos del tráfico rodado que – como es sabido – son significativamente superiores a aquellas emitidas por los vehículos con el motor en régimen “normal”. Este efecto es particularmente significativo en el caso de arranque en “frío” durante las frías mañanas del invierno en el interior de nuestra península.

Finalmente otro elemento sobre el que es necesario extremar el cuidado en su cálculo es el correspondiente a las emisiones biogénicas. Las emisiones de isoprenos y monoterpenos producidas por diferentes tipos de árboles son muy importantes debido a la elevada reactividad de

los terpenos – en particular del isopreno – y su gran importancia en la producción del ozono. Recordando que las emisiones de isoprenos dependen de la temperatura del aire – a esa hora y localización espacial – y del PAR (radiación activa fotosintética), es necesario utilizar la temperatura y el PAR “predichos” por el modelo meteorológico para esa hora y celdilla.

Por todo ello, el modelo de emisiones debe estar ciertamente vinculado al modelo meteorológico predictivo. Estas observaciones subrayan más, si cabe, el hecho de que los sistemas de modelización constituyen entes “integrales” puesto que los procesos en la atmósfera son “simultáneos” y completamente “interactivos” unos con otros por lo que de nuevo subrayamos el hecho de que la atmósfera es única y su parcelación en zonas o escalas debe realizarse siempre teniendo en cuenta esta continua integración e interacción entre las diferentes escalas. En realidad la mayor limitación al estudio integral de la atmósfera es la capacidad de cálculo de nuestras máquinas computacionales.

4.3 USOS DEL SUELO Y TOPOGRAFÍA

Los usos del suelo y la topografía son elementos también fundamentales para una correcta modelización de la calidad del aire. Los usos del suelo contribuyen al intercambio de flujos verticales desde la perspectiva de la dinámica meteorológica. La topografía es, lógicamente, esencial para la formación de los patrones dinámicos meteorológicos, en particular en los modelos no-hidrostáticos que debemos utilizar en entornos locales o en modelos con alta resolución espacial. Los usos del suelo son relevantes de cara a la modelización del depósito de contaminantes atmosféricos en la medida que forman parte de la resistencia de la Canopy o de la corteza terrestre además de contribuir a la modelización de la resistencia aerodinámica de forma muy importante. Las propiedades termodinámicas de los distintos tipos de cubierta son también muy importantes, puesto que determinan el intercambio de calor y humedad con la atmósfera, condicionando en gran medida la evolución de la capa de mezcla convectiva, aspecto muy influyente en el proceso de dispersión de contaminantes.

Se utilizarán diferentes clasificaciones de usos del suelo en un mismo modelo en función de la aplicación concreta de los mismos. Así para las emisiones biogénicas se necesita un tipo de clasificación más orientada a la tipología de árboles que aquella que se debe utilizar en la modelización meteorológica. En cuanto a la disponibilidad podríamos mencionar los usos del suelo con 100 m de resolución espaciales proporcionados por la Agencia Europea del Medio

Ambiente, las diferentes clasificaciones globales con 1 km de resolución proporcionadas por la USGS en los EE.UU. y muchas otras de libre disposición en Internet.

5. COMUNICACIÓN CON LOS RESPONSABLES DE LA ADMINISTRACIÓN PARA DETECTAR SUS NECESIDADES.

Es importante que los Grupos de Investigación en España estén en contacto con las diferentes administraciones en los diversos niveles con el objeto de intercambiar información. Muy frecuentemente, los grupos de investigación tienen dificultades para entender dichas necesidades debido a un cierto alejamiento tanto de estos de la administración como de la administración de los diferentes congresos y reuniones científicas que tienen lugar en el mundo sobre este tema.

Por otro lado, es también muy importante que la administración conozca las limitaciones e incertidumbres asociadas a cualquier herramienta de modelización de la calidad del aire con el objeto de que pueda intentar comprender mejor la aplicación a los problemas concretos que pueda tener. Sería conveniente insistir en el tema de la estandarización de la información. En este sentido el formato NetCDF con sus características multiplataforma y muy extendido es quizás una de las posibles soluciones, aunque no la única (GRID, ECMWF GRID, etc.)

Evidentemente existe una cierta distancia entre los modelistas y la administración y las empresas. Para salvar esta distancia en la medida de lo posible podríamos proponer diferentes medidas:

- ⌘ Los seminarios de la calidad del aire deberían ser mucho más frecuentes (el anterior tuvo lugar hace 6 años).
- ⌘ Celebración de jornadas informativas de resultados de proyectos, aplicaciones, etc relevantes abiertos no solo al mundo científico, sino al mundo de la administración y empresa.
- ⌘ Elaboración de guías específicas sobre distintos aspectos de la modelización, aplicación a la gestión de la calidad del aire, etc.
- ⌘ Creación de un portal Web sobre modelización en España (Ver cuestión 5).

5.1. REPRESENTATIVIDAD DE LOS DATOS DE LAS ESTACIONES DE CALIDAD DEL AIRE Y DEL DATO EN SÍ MISMO.

Para finalizar, los datos disponibles sobre niveles de inmisión medidos son fundamentales para la modelización de la calidad del aire. La importancia de esta información se deriva de varios aspectos. Por un lado, como condiciones iniciales y de contorno que es necesario considerar y por otro como referencia para la evaluación de los valores predichos por los modelos, aspecto fundamental para conseguir mejorar las técnicas y herramientas de modelización.

Las estaciones correspondientes a una red de calidad del aire proporcionan información, generalmente horaria, correspondiente a las concentraciones de diferentes contaminantes en dicho lugar en particular. Es importante tener en cuenta que observaciones y datos modelizados constituyen dos aspectos complementarios con incertidumbres en ambos casos. Así, la información correspondiente a las observaciones está caracterizada por una cierta incertidumbre que está regulada en las correspondientes directivas europeas. Asimismo, la incertidumbre asociada a los datos modelizados también está caracterizada – aunque de una forma menos detallada – por una cierta incertidumbre. Los modelos modernos de tipo Euleriano proporcionan datos modelizados correspondientes al valor promedio de una celdilla (típicamente 1 – 3 km de resolución y una altura entre 10 y 100 m) y el valor observado es representativo de un entorno de dicha celdilla – generalmente menor -. Dependiendo de la ubicación de la estación de monitorización en particular, este valor medido tendrá una representatividad mayor o menor.

Debemos observar que en general una estación ubicada en una zona suburbana o en el campo tiene una representatividad mayor que una estación ubicada en un entorno urbano – que es el caso de la mayoría de las estaciones en España -. Por otro lado, durante la noche la representatividad (100 m – 1 km) es muy superior a la representatividad durante el día (20 – 300 m) debido a la estratificación turbulenta estable en contraste con la inestable presente generalmente durante el día. Es importante, por consiguiente, recordar que los datos obtenidos por los modelos no son estrictamente comparables con los datos observados. Por otro lado, los datos procedentes de instrumentos perfiladores como el SODAR/RASS, el LIDAR, etc. proporcionan información integrada sobre un determinado espacio y la comparación con las observaciones siempre debe hacerse teniendo en cuenta estas características diferentes entre ambas magnitudes.

En la mayoría de los casos, no se conoce muy bien la representatividad de cada estación de medida. Habría que incentivar a que se hagan estudios para estimarla, bien por vía experimental, bien usando modelos, etc. Por otro lado, en otros muchos casos nos encontramos que existen quizás demasiadas estaciones en entornos urbanos, como en varias ciudades españolas.

De forma análoga a los puntos anteriores, se observa la posibilidad de mejorar notablemente la accesibilidad, transparencia y pautas de utilización de esta información. A parte de caracterizar la representatividad e incertidumbre de los datos observados, el desarrollo de una serie de metodologías de evaluación de las simulaciones llevadas a cabo, sería un aporte muy valioso. De nuevo, tomando como ejemplo iniciativas desarrolladas en EE.UU., sería interesante abordar el problema de la evolución de los modelos en sus diversas facetas (estadística, diagnóstica, incertidumbre, etc.) de forma representativa para la realidad española en función del tipo de modelo y aplicación.

Es importante que se extreme el cuidado en la validación de los datos pues en algunas ocasiones aparecen datos que son claramente constantes (y que es prácticamente imposible que el sensor se mantenga durante varias horas en un valor constante) o con valores claramente excesivos que son de imposible o extremadamente difícil explicación. Esto es particularmente cierto en el caso de datos de SO_2 donde valores bajos aparecen claramente constantes y válidos y en el caso del ozono con valores del orden de $800 \text{ } \sigma\text{gm}^{43}$ que si bien es posible que se deban a intrusiones estratosféricas, siembran dudas en el modelizador cuando trata de que su sistema reproduzca los datos observados como única referencia posible. Por ello, queremos insistir en la necesidad de extremar el cuidado en la validación de los datos observados en las diferentes redes de nuestro país.

6. CONCLUSIONES

- ✘ Debe existir mucha más investigación sobre los diferentes procesos atmosféricos en España y en particular la interacción entre las diferentes escalas.
- ✘ Debería existir un acceso a la información meteorológica más sencillo a través de Internet, en particular para usos científicos y para las administraciones públicas. En este sentido el ejemplo seguido por los Estados Unidos, ofreciendo toda la información meteorológica, incluso aquella

en tiempo real, a través de Internet sería un ejemplo deseable a seguir por parte del Instituto Nacional de Meteorología y el Centro Europeo en Reading (ECMWF)..

- ✘ El inventario nacional de emisiones de contaminantes atmosféricos, que presenta un gran nivel de información (una amplio número de contaminantes, separada por sectores, georreferenciación, etc), puede mejorarse en el sentido de dar información en mallas horizontales de resolución de 1 Km o similar. No obstante, todas las mejoras en la resolución temporal (lo ideal, sería horaria) y en la especiación de COV, serían bienvenidas. El inventario de referencia debería tener - cómo el del Reino Unido de Gran Bretaña - 1 km de resolución y ser al menos anual. Es recomendable la existencia de inventarios regionales compatibles con el inventario nacional. Sería deseable que estas mejoras se extendiesen igualmente a las proyecciones de emisión.
- ✘ Es necesario conocer una estimación de la representatividad espacial de los datos medidos en las diferentes redes de calidad del aire con el objeto de intentar compatibilizar al máximo los resultados obtenidos por los modernos modelos (rejilla) con los valores observados.
- ✘ Parece necesario disponer de un lugar donde la información pueda ser accesible por el ciudadano tanto a través de Internet como in situ y haya en lo posible uniformidad de formatos.
- ✘ Es necesario intensificar la organización de congresos, conferencias, seminarios, workshops, grupos de trabajo (como el responsable de este documento), redes temáticas, etc. con el fin de facilitar el dialogo no solo entre los investigadores sino entre estos, las autoridades ambientales – a todos los niveles – y el público en general. Sería recomendable la existencia de un portal web de modelización de la calidad del aire.
- ✘ Es necesario tener un cuidado especial en la validación de los datos de las estaciones de medida pues en algunas ocasiones se han observado validaciones en datos claramente dudosos – valores de ozono superiores a 1000 $\sigma g m^{43}$ -.
- ✘ Los escenarios meteorológicos se utilizarán como una referencia relativa debido a que muchos episodios de contaminación atmosférica no pueden asociarse a un tipo de escenario meteorológico específico pues el motivo de muchos episodios es consecuencia de la convergencia e integración de muchos procesos físicos y químicos.
- ✘ Se recomienda la simulación con los modelos meteorológicos de largos periodos de tiempo. Periodos de un año serían los más indicados e incluso para determinadas aplicaciones, periodos superiores. Las conclusiones obtenidas con periodos de tiempo inferiores deben tomarse con precaución.
- ✘ Se debe poner mucho más énfasis en la elaboración de modelos predictivos de emisiones. En este sentido, la incorporación de las previsiones de grandes fuentes industriales es esencial para una buena predicción de las concentraciones. Esta información solo puede

proporcionarla la entidad propietaria de la fuente. Las previsiones de las emisiones biogénicas deben enlazarse directamente siempre con las previsiones de temperatura y radiación solar para cada hora y para cada localización espacial.

7. BIBLIOGRAFÍA

Albizu Mariví (1994) Tesis Doctoral "Dinámica en el Estuario del Nervión :Influencia de los contrastes térmicos mar-tierra en los episodios de Contaminación de Bilbao" UCM.

Bolle, H.J. (editor) (2003) *Mediterranean Climate: Variability and Trends*. Springer-Verlag. Berlin. Germany. Cap. 1.

Byun, D.W., J. Young, G. Gipson, J. Godowitch, F. Binkowsky, S. Roselle, B. Benjey J. Pleim, J.K.S. Ching, J. Novak, C. Coats, T. Odman, A. Hanna, K. Alapaty, R. Mathur, J. McHenry, U. Shankar, S. Fine, A. Xiu, and C. Lang, 1998. Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model. Proceedings of the American Meteorological Society 78th Annual Meeting Phoenix, AZ, Jan. 11-16, 1998. pp. 264-268.

Capel, J.J. (1981) *Los climas de España*. Colección Ciencias Geográficas. Oikos-tau, s.a. - ediciones. Barcelona.

FUMAPEX (2002-2005) Integrated Systems for Forecasting Urban Meteorology, Air Pollution and Population Exposure. Funded by the European Commission. Informe Final en <http://fumapex.dmi.dk/>

Gangoiti, G.; Millán, M. M.; Salvador, R.; Mantilla, E. (2001) "Long-range transport and re-circulation of pollutants in the western Mediterranean during the project Regional Cycles of Air Pollution in the West-Central Mediterranean Area". *Atmospheric Environment* 35, 6267-6276.

Iribarne, J.V.; Cho, H.R. *Atmospheric Physics*. D. Reidel Publishing Company. USA. Cap. 1.

Martín, J. (1987) *Característiques climatològiques de la precipitació en la franja costera mediterrània de la península Ibèrica*. Tesis Doctoral. Institut Cartogràfic de Catalunya. Generalitat de Catalunya.

Meteorological Office (1962). *Weather in the Mediterranean, vol. 1, General Meteorology*, p. 391, Air Ministry, Meteorological Office, Her Majesty's Stn. Off., London, U.K. Code No. 40-142-1-62.

Millán (editor) (1992) Meso-meteorological Cycles of Air Pollution in the Iberian Peninsula, (MECAPIP), *Air Pollution Research Report 44*, (EUR N_14834), European Commission DG XII/E-1, Rue de la Loi, 200, B-1040, Brussels.

Millán, M. (2002) Ozone dynamics in the Mediterranean basin. A collection of scientific papers resulting from the MECAPIP, RECAPMA and SECAP Projects. Air Pollution Research Report 78. Brussels

Orlanski, J. (1975) "A rational subdivision of scales for atmospheric processes". *Bull. Amer. Meteorol. Soc.* 56, 527-530.

Palau, J. L. (2003) *Dispersión atmosférica de las emisiones de una chimenea alta en terreno complejo*. Ed. Fundación CEAM. Paterna (Valencia). 366 páginas.

Palau, J. L.; Pérez-Landa, G.; Diéguez, J. J.; Monter, C. and Millán, M. M. (2005) The importance of meteorological scales to forecast air pollution scenarios on coastal complex terrain. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5, 2771-2785.

Raso, J.M. (1978) *El clima de Baleares*. Tesis doctoral. Dept. Geografía. Universitat de Barcelona. Citado en Martin, J. (1987).

San José, R., Pérez J.L. and González R.M. (2004) A mesoscale study of the impact of industrial emissions by using the MM5-CMAQ modelling system. *Int. J. Environment and Pollution*. Vol. 22. 2004 pp.144-162. ISSN: 0957-4352

San José R., Stohl A., Karatzas K., Bohler T., James P. and Pérez J.L. (2005) A Modelling Study of an Extraordinary Night Time Episode over Madrid domain. *Environmental Modelling and Software*. Vol. 20. 2005. pp. 587-593. ISSN: 1364-8152.

San José R., Pérez J.L. and González R.M. (2006) The use of MM5-CMAQ for an Incinerator Air Quality Impact Assessment for metals, PAH, Dioxins and Furans: Spain case study. *Lecture Notes, Large-Scale Scientific Computations*, pp. 498-505. ISSN: 0302-9743, Springer-Verlag GmbH. Computer Science. Vol 3743/2006.

CAPÍTULO 3

¿QUÉ TIPO DE REQUERIMIENTOS DEBEN EXIGIRSE A LOS MODELOS PARA CADA PROBLEMA O CADA ZONA DE ESPAÑA?

Responsable:

José M^a Baldasano, BSC-CNS

Colaborador externo :

Pedro Jiménez, BSC-CNS

Índice

1. ¿Qué tipo de modelo, metodología o procedimiento hay que aplicar para cada problema?
 - 1.1 Terreno plano y homogéneo
 - 1.2 Terreno plano y no homogéneo
 - 1.3 Terreno con colinas
 - 1.4 Terrenos de topografía compleja o muy compleja
 2. ¿Qué datos se necesitan?
 - 2.1 Emisiones
 - 2.2 Variables meteorológicas
 - 2.3 Velocidades de fotólisis
 - 2.4 Condiciones iniciales y de contorno
 - 2.5 Datos necesarios para la validación de modelos de calidad del aire
 3. ¿Modelos reglamentarios oficiales o establecimiento de requerimientos y guías de uso de modelos?
 4. ¿Cuál es la fiabilidad de los modelos? ¿Cómo puedo estimarla? ¿Es suficiente o no?
 - 4.1 Validación de modelos operativos de calidad del aire
 5. Referencias
- Anexo I. Validación de modelos de calidad del aire

1. ¿QUÉ TIPO DE MODELO, METODOLOGÍA O PROCEDIMIENTO HAY QUE APLICAR PARA CADA PROBLEMA?

Los algoritmos simplificados que han sido implementados en los modelos usados reglamentariamente (“*regulatory*”) en las últimas décadas, especialmente en los EE.UU., están orientados principalmente para la valoración del impacto de un penacho en su área de influencia, que para la mayoría de chimeneas, salvo ciertos casos de chimeneas altas o muy altas, tienen una incidencia básicamente de tipo local. Estos modelos se basan esencialmente en unas hipótesis de flujo estacionario y una uniformidad horizontal. En consecuencia, no son válidos cuando las complejidades del terreno provocan circulaciones locales y mesoescalares, que a su vez interactúan con la escala sinóptica. Las zonas con terreno complejo y usos del suelo muy heterogéneos ejercen una influencia muy importante en la dispersión de los contaminantes atmosféricos que difícilmente puede ser descrita con modelos simples.

En presencia de circulaciones complejas (situaciones de brisa marina y terrestre, canalización por valles, vientos de montaña, etc.), las cuales se dan abundantemente en la península Ibérica, el impacto de las emisiones está determinado en muchos casos por trayectorias no estacionarias tridimensionales y con procesos de recirculación de los contaminantes. En estos casos, el cálculo tridimensional de los campos meteorológicos, así como en el caso de reacciones químicas, se hace fundamental. En los últimos años, un esfuerzo de investigación y desarrollo, así como el desarrollo de ordenadores mucho más rápidos, permite que modelos más complejos puedan estar disponibles, aunque esfuerzos en armonización, validación e implementación quedan a realizar, si los mismos se quieren utilizar con fines de gestión.

A continuación se examinan los flujos atmosféricos sobre diferentes tipos de terreno, analizándose en cada caso las necesidades específicas, y el tipo de modelo a considerar en cada caso (Baldasano y Millán, 2000).

1.1 TERRENO PLANO Y HOMOGÉNEO

Responde a las características de un terreno llano y cuyas características (tipo de suelo, usos del suelo, rugosidad, albedo, humedad disponible, etc.) son muy homogéneas y por tanto su influencia es uniforme en el flujo de la capa límite.

El flujo atmosférico sobre este tipo de terreno puede ser descrito por un modelo simple unidimensional, y los perfiles verticales estimados en base a parametrizaciones simples. En estos casos no es necesaria una modelización de los flujos atmosféricos generales. Este tipo de flujo es el único donde el uso del tradicional modelo de dispersión gaussiano estaría teóricamente justificado.

Su validez espacial se limita a la escala de dispersión local (1-20 km).

Requerimientos en los resultados del flujo	<i>Viento vertical horizontalmente homogéneo y perfil de turbulencia</i>
Modelos para el cálculo del viento	<i>Modelos simples 1-D</i>
Necesidades de datos de entrada meteorológicos	<i>Estación meteorológica climatológicamente representativa</i>
Pre-procesador del terreno	<i>Evaluación de la rugosidad del terreno según los usos</i>
Validez del flujo	<i>Escala local (1-20 km)</i>
Necesidades del estudio meteorológico	<i>Descripción básica de la dispersión en una escala temporal a largo plazo</i> <i>Búsqueda de los efectos contaminantes adversos (impacto)</i>
Problemas especiales	<i>Viento en calma</i>
Requerimientos informáticos	<i>Bajos (ordenador personal)</i>
Nivel de experiencia	<i>Bajo (PC)</i>
Comentarios	<i>Por razones de simplicidad, los modelos utilizados reglamentariamente ("regulatory") son usados en tales condiciones. Se pueden usar para evaluaciones preliminares en casos concretos.</i>
Modelos de dispersión	<i>Es el único contexto donde los modelos tradicionales Gaussianos están teóricamente justificados</i>

1.2 TERRENO PLANO Y NO HOMOGÉNEO

Ciertas circulaciones importantes, tanto locales como mesoescalares, son observadas cuando sobre un terreno plano se presentan diferencias significativas en las características del terreno. Éstas implican diferencias en las temperaturas superficiales y en los flujos turbulentos, que

pueden causar el desarrollo de capas límites internas debido a efectos advectivos, donde fuertes gradientes horizontales dan lugar a circulaciones tridimensionales, las cuales normalmente presentan una periodicidad diaria. Para evaluar tales situaciones de dispersión, una correcta descripción de las características tridimensionales del flujo y de su evolución temporal es de importancia fundamental debido a las características de no-homogeneidad y transitoriedad del flujo.

Requerimientos en los resultados del flujo	<i>Vientos y turbulencia 3-D con suficiente resolución para resolver los patrones del flujo atmosférico (resolución espacial del orden de 1 km)</i>
Modelos para el cálculo del viento	<ul style="list-style-type: none"> § Modelos consistentes en masa (3-D) § Modelos hidrostáticos
Necesidades de datos de entrada meteorológicos	<i>Desde un conjunto de estaciones de superficie y de sondeos que permita resolver el flujo 3-D</i>
Pre-procesador del terreno	<i>Conocimiento de los usos del suelo y su clasificación</i>
Validez del flujo	<i>Escala local (1-20 km) y escala regional (20-500 km)</i>
Necesidades del estudio meteorológico	<ul style="list-style-type: none"> § Descripción de la dispersión en una escala temporal a corto (diaria) y a largo plazo (estaciones, anual) § Representatividad de los flujos sinópticos con la influencia de las circulaciones locales
Problemas especiales	<ul style="list-style-type: none"> § Adecuado conjunto de datos iniciales § Condiciones iniciales y de contorno § Necesidad de evaluar los resultados (representatividad, etc.)
Requerimientos informáticos	<ul style="list-style-type: none"> § Pequeño-moderado (PC) § Moderado (estación de trabajo)
Nivel de experiencia	<i>Se necesita una comprensión elevada de los flujos en la capa límite y del uso de los modelos de simulación</i>
Comentarios	<i>La elección del modelo debe estar debidamente justificada y documentada</i>

1.3 TERRENO CON COLINAS

Este tipo de terreno se puede definir como un terreno ondulado, sin grandes complejidades topográficas y sin grandes alturas, ni rugosidades con pendientes suaves y con formas

redondeadas. Las mayores características de flujo sobre colinas son dominadas no sólo por la forma de las colinas, sino también por su tamaño y pendiente, y por la estabilidad atmosférica. Este tipo de flujo, para estabildades neutras o estables, puede ser descrito mediante modelos de diagnóstico de tipo lineal o con modelos hidrostáticos.

Requerimientos en los resultados del flujo	<i>Vientos y turbulencia 3-D con suficiente resolución para resolver los patrones del flujo atmosférico</i>
Modelos para el cálculo del viento	<i>Modelos de diagnósticos de tipo lineal, Modelos hidrostáticos</i>
Necesidades de datos de entrada meteorológicos	<i>Estación meteorológica representativa (o un perfil del viento y de la temperatura)</i>
Pre-procesador del terreno	<i>Topografía y rugosidad del terreno según los usos</i>
Validez del flujo	<i>Escala local (1-20 km) y escala regional</i>
Necesidades del estudio meteorológico	<i>Descripción básica de la dispersión en una escala temporal a largo plazo, incluyendo la representatividad de los datos meteorológicos</i> <i>Búsqueda de los efectos contaminantes adversos (impacto)</i>
Problemas especiales	<i>Flujo no válido cuando se presentan fenómenos de separación</i>
Requerimientos informáticos	<i>Bajos (PC) o moderadas</i>
Nivel de experiencia	<i>Se necesita una comprensión básica de los flujos en la capa límite y del uso de los modelos de simulación</i>
Comentarios	<i>La elección del modelo debe estar debidamente justificada y documentada</i>
Modelos de dispersión	<i>Modelos de dispersión: lagrangianos (chimeneas, etc.) y eulerianos (zonas determinadas)</i>

1.4 TERRENOS DE TOPOGRAFÍA COMPLEJA O MUY COMPLEJA

La topografía compleja puede ser descrita como una zona montañosa o de montañas, con crestas, valles, con pendientes pronunciadas o fuertes. Este tipo de terreno induce circulaciones de origen térmico y mecánico tales como brisas montaña-valle, vientos anabáticos y catabáticos, y modifica sustancialmente el flujo sinóptico. En este tipo de topografía, hipótesis simples no son soportadas, y el flujo solo puede ser descrito por campañas experimentales en conjunción con

modelos complejos de probada capacidad. Es necesario un sistema completo de simulación del flujo con una alta resolución espacial.

Requerimientos en los resultados del flujo	<i>Vientos y turbulencia 3-D con suficiente resolución para resolver los patrones del flujo atmosférico (resolución espacial del orden de 0.5-1 km)</i>
Modelos para el cálculo del viento	<i>Modelos no-hidrostáticos</i>
Necesidades de datos de entrada meteorológicos	<ul style="list-style-type: none"> § <i>Condiciones iniciales y de contorno 3-D, basadas en un conjunto de estaciones de superficie y de sondeos que permita resolver el flujo 3-D (modelo de diagnóstico consistente en masa), o a partir de modelos meteorológicos de mayor escala</i> § <i>Capacidad de efectuar asimilación de datos para asegurar el pronóstico</i>
Pre-procesador del terreno	<i>Topografía, usos del suelo y su clasificación</i>
Validez del flujo	<i>Escala local (1-20 km) y escala regional (20-500 km)</i>
Necesidades del estudio meteorológico	<ul style="list-style-type: none"> § <i>Descripción de la dispersión en una escala temporal a corto (diaria) y a largo plazo (estaciones, anual)</i> § <i>Representatividad de los flujos sinópticos con la influencia de las circulaciones locales</i>
Problemas especiales	<ul style="list-style-type: none"> § <i>Adecuado conjunto de datos iniciales</i> § <i>Condiciones iniciales y de contorno</i> § <i>Disponibilidad de inventarios de emisiones</i> § <i>Necesidad de evaluar los resultados (representatividad, etc.)</i>
Requerimientos informáticos	<i>Moderados o Altos (estación de trabajo-supercomputadores)</i>
Nivel de experiencia	<i>Muy especializada (amplia experiencia en ciencias de la atmósfera y computacionales)</i>
Comentarios	<i>Están en fase avanzada para ser usados de forma operacional</i>
Modelos de dispersión	<i>Modelos de dispersión: lagrangianos (chimeneas, etc.) y eulerianos (zonas determinadas)</i>

A modo de resumen, en la siguiente tabla se indican los tipos de modelo meteorológico y escala espacial según los tipos de terreno

Tipo de terreno	Modelo diagnóstico	Modelo pronóstico	Escala
Terreno plano y homogéneo	1-D		Local
Terreno plano y no homogéneo	Modelo consistente en masa	Hidrostático	Local
Terreno con colinas	1-D, Modelo lineal, consistente en masa	Hidrostático	Local-Regional
Terreno complejo o muy complejo	Modelo consistente en masa	No-hidrostático	Local-Regional

2. ¿QUÉ DATOS SE NECESITAN?

En general, los datos de entrada que requieren los modelos de calidad del aire son, básicamente: (1) Emisiones, generalmente proporcionados por un modelo de inventario de emisiones; (2) Datos meteorológicos (campos meteorológicos); (3) Otros: latitud, día del año, velocidades de depósito, velocidades de fotólisis, orografía del terreno, usos del suelo, condiciones iniciales y de contorno, etc. Estos datos varían en función de la hipótesis o simplificaciones realizadas en el desarrollo y aplicación del modelo.

2.1 EMISIONES

Un punto clave en los modelos de calidad del aire es determinar la forma en que la concentración de un contaminante responde a las emisiones, y la exactitud de éstas son fundamentales en el funcionamiento del modelo. Las emisiones se desarrollan de acuerdo con el modelo de dispersión, en el caso de los CTM (*Chemical Transport Models*) para ser compatibles con el mecanismo químico empleado, y con la resolución del modelo, tanto horizontal como vertical. En este último caso deben incluir, como mínimo, estimaciones horarias y espaciales de las emisiones de CO, NO, NO₂, COV (precursores de la formación de ozono troposférico), SO₂ y material particulado. Las estimaciones de las emisiones se llevan a cabo empleando **modelos de emisiones desagregadas**. Las emisiones son, probablemente, una de las mayores fuentes de incertidumbre en la aplicación de modelos de calidad del aire.

2.2 VARIABLES METEOROLÓGICAS

Los modelos de calidad del aire requieren datos e información meteorológica: los campos de vientos, horarios, horizontales y verticales, al igual que datos de temperatura, humedad, radiación solar y altura de la capa de mezcla. Algunos modelos utilizan, igualmente, difusividades verticales, características de las nubes (contenido de agua líquida, tamaño de gotas, tamaño de nubes, etc.) y lluvias caídas. Toda esta información es suministrada, de forma complementaria, hoy en día por los **modelos meteorológicos**. Los primeros estudios de calidad del aire empleaban modelos de diagnóstico, basados en observaciones en el dominio del modelo. Algunas aplicaciones recientes de modelos de calidad del aire, no obstante, consideran más adecuado usar modelos meteorológicos de pronóstico, siendo los modelos no hidrostáticos los más utilizados para aplicaciones de alta resolución.

2.3 VELOCIDADES DE FOTÓLISIS

La fotólisis es uno de los parámetros más importantes en la química troposférica. Sin la fotólisis del dióxido de nitrógeno, no habría una formación significativa de ozono troposférico. Igualmente, sin fotólisis, de O_3 y carbonilos en la troposfera, no habría producción de radicales hidroxilo, y consecuentemente, la reactividad de los COV sería nula. Los procesos físicos que determinan la velocidad de fotólisis son: incidencia de la radiación solar en la parte superior de la atmósfera con un determinado ángulo cenital, la absorción molecular de la radiación por los constituyentes de la atmósfera, la reflexión de la radiación solar por las nubes, aerosoles, y por la superficie, y la dispersión de la radiación solar por las nubes y partículas de aerosoles, y por las moléculas atmosféricas.

2.4 CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

Cuando un modelo de calidad del aire se aplica para simular un episodio de contaminación, se deben detallar los campos de concentración de todas las especies implicadas en el modelo al principio de la simulación. Estos campos de concentración se denominan "condiciones iniciales". A lo largo de la simulación se necesita especificar la concentración de las especies en el aire que entra en el dominio geográfico tridimensional. A dichas concentraciones se les conoce como "condiciones de contorno". Existen tres aproximaciones para calcular las condiciones iniciales y de contorno que van a ser entradas de un modelo de calidad del aire: (1) uso de las salidas-resultados de otro modelo fotoquímico de mayor escala; (2) uso de técnicas objetivas o de

interpolación con datos reales; o (3) uso de valores de fondo por defecto, y expandiendo el área que está siendo modelada, prolongando el periodo de simulación para minimizar las incertidumbres debido a la falta de medidas. En un caso ideal, los datos observados son poco útiles para generar dichas condiciones, por lo que se suelen usar modelos globales o regionales para generar las condiciones iniciales y de contorno. Donde la cobertura espacial de los datos sea escasa, se pueden emplear métodos de interpolación para distribuir las medidas ambientales superficiales. Generalmente, se asume que la concentración de las especies es uniforme en la capa de mezcla, puesto que no se realizan medidas de calidad del aire en altura. La incertidumbre en las condiciones iniciales, por otro lado, no es tan significativa comparada con la incertidumbre en la predicción de las condiciones de contorno.

2.5 DATOS NECESARIOS PARA LA VALIDACIÓN DE MODELOS DE CALIDAD DEL AIRE

Para las actividades de validación de modelos de calidad del aire, se deberá contar con los datos experimentales suministrados por diversas redes de medida de calidad del aire (tales como EMEP, Comunidades Autónomas, etc.), otras estaciones automáticas posibles, ozonosondas e imágenes satelitales; además de otros datos ya validados por las entidades medioambientales correspondientes e información complementaria meteorológica, bases de datos procedentes de campañas experimentales de diferentes proyectos, etc..

3. ¿MODELOS REGLAMENTARIOS OFICIALES O ESTABLECIMIENTO DE REQUERIMIENTOS Y GUÍAS DE USO DE MODELOS?

La tendencia actual en el uso de modelos de calidad del aire para aplicaciones reglamentarias se enfoca principalmente hacia el establecimiento de guías de uso de modelos de calidad del aire frente al establecimiento de modelos oficiales, puesto que los modelos actuales continúan en desarrollo y cada uno de ellos presentan sus puntos fuertes y sus limitaciones (Russell, 2000). Las guías de aplicación de modelos de calidad del aire, según US EPA (2005), deben ser documentos dinámicos, sometidos a continua revisión por parte de usuarios y modelizadores con el fin de cubrir las necesidades y requisitos establecidos por los problemas de calidad del aire que deben ser resueltos. Igualmente, las guías de aplicación de calidad del aire deben tratar dos aspectos principales: el primero de ellos es cubrir la cuestión relativa a cómo se deben usar los resultados de los modelos y otras medidas para cumplir con los requisitos de aceptación de los modelos de calidad del aire; el segundo aspecto a considerar es cómo se deben aplicar los modelos de

calidad del aire para asegurar el cumplimiento de los requisitos de aceptación. El procedimiento recomendado para aplicar un modelo de calidad del aire tiene nueve pasos fundamentales:

- (1) Desarrollar una descripción conceptual del problema a solucionar.
- (2) Desarrollar un protocolo de modelización y análisis.
- (3) Seleccionar un modelo apropiado para la aplicación a considerar.
- (4) Seleccionar los períodos meteorológicos adecuados para estudiar el rendimiento del modelo.
- (5) Elegir un área apropiada para modelizar con la resolución horizontal y vertical adecuada, y establecer las condiciones iniciales de contorno que son adecuadas para la aplicación.
- (6) Generar los datos meteorológicos para el modelo de calidad del aire.
- (7) Generar los datos de emisiones para el modelo de calidad del aire.
- (8) Evaluar el rendimiento del modelo de calidad del aire y realizar tests de diagnóstico para mejorar el modelo, si fuese necesario.
- (9) Realizar modelización de escenarios futuros (incluyendo estrategias de control adicionales si fuese necesario).

4. ¿CUÁL ES LA FIABILIDAD DE LOS MODELOS? ¿CÓMO PUEDO ESTIMARLA? ¿ES SUFICIENTE O NO?

La US Environmental Protection Agency (US EPA) ha desarrollado una serie de directrices (US EPA, 2005), basadas en las directrices del año 1991 (US EPA, 1991) para el uso de una serie de medidas estadísticas en evaluación de modelos para aquellas zonas donde los datos de monitorización son suficientemente densos. Estas medidas son el sesgo normalizado (MNBE), el error relativo normalizado (MNGE) y la exactitud en la predicción del pico (UPA). Los criterios informales de ajuste o estándar de rendimiento han evolucionado durante más de diez años para proporcionar un marco de estudio a la hora de calificar el rendimiento de los modelos de calidad de aire. Los criterios aceptados son: MNBE ± 5 a $\pm 15\%$; MNGE $+30$ a $+35\%$; y UPA ± 15 a $\pm 20\%$. Se acepta que un modelo funcione bajo estos valores estadísticos una vez eliminadas las influencias de las condiciones iniciales y de contorno. La US EPA sugiere otras medidas que pueden utilizarse, como son la media para todas las estaciones en la exactitud de la predicción del pico, sesgo de todos los pares de datos por encima de un umbral, sesgo de todos los picos de las estaciones y sesgo fraccional para la concentración de pico.

De otro lado, para España el Real Decreto 1796/2003 y la Directiva 2002/3/CE establecen como aceptable para modelización de Ozono una incertidumbre del 50% para las medias horarias (durante el día) y para la máxima octohoraria diaria. La incertidumbre de la modelización viene definida como la desviación máxima de los niveles de concentración medidos y calculados, durante el período de cálculo del umbral apropiado, sin tener en cuenta la cronología de los sucesos. El Real Decreto 1073/2002 y la Directiva 1999/30/CE establecen que la exactitud requerida por los métodos de modelización debe presentar una incertidumbre de las medias horarias menor al 50-60% para los contaminantes Dióxido de Azufre, Dióxido de Nitrógeno y Óxidos de Nitrógeno, inferior al 50% para las medias diarias y un 30% para las medias anuales. La exactitud de la modelización se define de manera análoga a la incertidumbre en la modelización de ozono (desviación máxima de los niveles de concentración medidos y calculados durante el período considerado por el valor límite, sin tener en cuenta la periodicidad de los fenómenos).

Para la evaluación del modelo se deben tener en cuenta las directrices anteriormente señaladas por la USEPA, al igual que las guías establecidas por las Directivas Europeas y la legislación española. La metodología a seguir se presenta en el Anexo I.

4.1 VALIDACIÓN DE MODELOS OPERATIVOS DE CALIDAD DEL AIRE

El desarrollo de un modelo de predicción, dispersión y evaluación de la calidad del aire utilizando las técnicas más avanzadas en modelización numérica representa una herramienta fundamental para afrontar las obligaciones de evaluación y gestión de la calidad del aire que imponen las Directivas europeas (1996/62/CE, 1999/30/CE para NO_x, SO₂, y partículas; 2002/3/CE O₃ troposférico en aire ambiente) y su correspondiente transposición a la legislación estatal (RD 1073/2002 y 1796/2003). Según establecen estas normativas, se considera la modelización numérica de la calidad del aire como una técnica con capacidad para analizar las zonas con superaciones de los umbrales de concentración de contaminantes atmosféricos, predecir la calidad del aire y desarrollar planes y programas de mejora de la misma, así como, para entender de una forma integrada los procesos causantes de la contaminación.

La modelización numérica del pronóstico de la calidad del aire representa en este sentido una herramienta fundamental y estratégica para poder informar a la población de las potenciales superaciones de umbrales de información a la población y alerta a la población cuando se

produzcan episodios de superaciones de concentraciones de ozono, o poder realizar alertas cuando se supere el valor límite de protección para la salud humana para el caso de NO_x y partículas. El sistema de validación debe diseñarse orientado a determinar la capacidad de los modelos a predecir correctamente las superaciones de valores límite, umbrales de aviso a la población y alertas, así como de su capacidad para ajustarse a la series temporales de datos medidos contrastando la información de medidas disponibles (datos de estaciones de calidad del aire, meteorológicas, imágenes satelitales, etc.).

El sistema de validación operacional deberá tener dos niveles:

- (1) Un nivel de interacción simplificado (nivel I), que debe implementarse de forma rutinaria en el sistema de pronóstico basado en una serie de estadísticos que se seleccionarán, haciendo especial hincapié en estadísticos clásicos discretos, categóricos o índices de habilidad, siguiendo los criterios de Calidad del aire de la UE (Directiva O₃, NO y NO₂).
- (2) Un segundo nivel más complejo de validación a nivel de escenarios (nivel II) haciendo hincapié en los componentes de la herramienta de pronóstico, que debe realizarse pero no puede hacerse de forma rutinaria, sino en base a la información complementaria disponible y en función de los escenarios que se consideren.

Para el nivel I de validación, se deberá permitir la comparación entre los resultados del modelo (superficie, columna) y las observaciones disponibles. La información a suministrar se puede presentar en forma de gráficos y estadísticos asociados (tanto estadísticos discretos –BIAS; RMSE; UPA- como categóricos –probabilidad de detección, índice crítico de éxito, falsa alarma, etc.). Este nivel I de validación del sistema operacional tiene lugar en tres fases:

- ∉ Tiempo casi-real (automática): validación a partir de datos de estaciones automáticas (datos directos de las estaciones) para identificar inestabilidades en las integraciones de los modelos.
- ∉ A 3 días: validación realizada tres días después del pronóstico con observaciones verificadas por los entes responsables de las observaciones.
- ∉ A medio plazo (6 meses): una vez recopilada una base de datos de 6 meses de observaciones validadas se realizará una validación del comportamiento del modelo bianual.

El nivel II es también importante, dado que para que el pronóstico sea efectivo hay que asegurar que los diferentes componentes reproducen situaciones observadas para las que se dispone de una intensa documentación experimental. Por ello, se debe validar la bondad de las simulaciones meteorológicas en primer lugar, de forma independiente. El modelo de calidad del aire debe, por lo tanto, validarse con datos experimentales seleccionados para representar situaciones típicas de transporte y difusión en el área de estudio en función de su estacionalidad y localización geográfica y procesos dominantes correspondientes. Una vez validados y ajustados, si es necesario, los modelos, se procederá a validar los resultados con campos de concentraciones medidas experimentalmente y seleccionadas.

Estos dos estadios de validación de los modelos de calidad del aire operativos permiten analizar el comportamiento del modelo, sus puntos fuertes y sus debilidades, y detectar posibles errores sistemáticos del modelo. La validación tiene dos aplicaciones importantes: (1) la primera se centra en la mejora de los modelos de pronóstico. Los estadísticos y skill scores (marcadores de habilidad) permitirán tomar decisiones para focalizar en aspectos concretos de mejora del modelo; (2) la segunda aplicación está orientada a los usuarios finales de los pronósticos operativos del modelo.

Es primordial que el sistema de validación no sea un sistema estático, sino que esté en continua mejora de su capacidad y, por tanto, de la calidad de las predicciones.

5. REFERENCIAS

Baldasano, J.M., Millán, M., 2000. Guía para la aplicación de modelos de calidad del aire. IV Seminario sobre la Calidad del Aire en España, 38 pp.

Russell, A., Dennis, R., 2000. NARSTO critical review of photochemical models and modelling. Atmospheric Environment 34, 2283-2324.

US EPA, 1991. Guideline for Regulatory Application of the Urban Airshed Model. US EPA Report No. EPA-450/4-91-013. Office of Air and Radiation, Office of Air Quality Planning and Standards, Technical Support Division. Research Triangle Park, North Carolina, US.

US EPA, 2005. Guidance on the use of models and other analyses in attainment demonstrations for the 8-hour ozone NAAQS. US EPA Report No. EPA-454/R-05-002. Office of Air Quality Planning and Standards. Research Triangle Park, North Carolina, US, October 2005, 128 pp.

ANEXO I. VALIDACIÓN DE MODELOS DE CALIDAD DEL AIRE

Históricamente, los test de evaluación examinan la distribución de los contaminantes de interés, como son los óxidos de nitrógeno (NO_x) o los compuestos orgánicos volátiles (COV). Sin embargo, una de las principales preocupaciones continúa siendo la previsión de los valores máximos horarios de ozono troposférico.

La US Environmental Protection Agency (US EPA, 1991; 2005) ha desarrollado una serie de directrices para el uso de una serie de medidas estadísticas en evaluación de modelos para aquellas zonas donde los datos de monitorización son suficientemente densos. Estas medidas son el bias normalizado (D), el error relativo normalizado para concentraciones por encima de un umbral prescrito (E_d) y la exactitud en la predicción del pico (A_u)

$$D = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \frac{C_p(x_i, t) - C_o(x_i, t)}{C_o(x_i, t)}, t=1,24 \quad (\text{Eq. 1})$$

$$E_d = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \frac{|C_p(x_i, t) - C_o(x_i, t)|}{C_o(x_i, t)}, t=1,24 \quad (\text{Eq. 2})$$

$$A_u = \frac{C_p(x, t)_{\max} - C_o(x', t')_{\max}}{C_o(x', t')_{\max}} \Delta 100 \quad (\text{Eq. 3})$$

donde N es el número de estaciones de monitorización, $C_o(x_i, t)$ el valor observado en la estación de medida i para la hora t, $C_p(x_i, t)$ el valor predicho en la estación i para la hora t, $C_o(x', t')_{\max}$ es la observación máxima horaria en todas las estaciones de medida y $C_p(x, t)_{\max}$ representa la concentración máxima horaria predicha por el modelo en todo el dominio de simulación. La US EPA establece, en el caso de ozono, un umbral de 60 ppb ($120 \mu\text{g}/\text{m}^3$) para el cálculo de E_d . Sin embargo, este umbral puede variar en función del caso en estudio.

Kang *et al.* (2003, 2004) y Eder *et al.* (2006), dentro del programa piloto de Previsión de la Calidad del Aire de la National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA), desarrollaron e implementaron un protocolo de evaluación de modelos de calidad del aire. Dentro de dicho protocolo, se identificaron una serie de parámetros estadísticos para facilitar la evaluación tanto de

las previsiones discretas (concentraciones observadas versus simuladas) como de las previsiones categóricas (superaciones / no superaciones observadas versus simuladas).

Previsión discreta

Para la previsión discreta se emplean dos medidas de bias (bias medio, MB, y bias medio normalizado, NMB) y dos medidas del error (error cuadrático medio normalizado, RMSE, y error medio normalizado, NME):

$$MB = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\text{Model} - \text{Observations}) \quad (\text{Eq. 4})$$

$$NMB = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\text{Model} - \text{Observations})}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\text{Observations})} \Delta 100\% \quad (\text{Eq. 5})$$

$$RMSE = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\text{Model} - \text{Observations})^2 \right)^{0.5} \quad (\text{Eq. 6})$$

$$NME = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\text{Model} - \text{Observations}|}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\text{Observations})} \Delta 100\% \quad (\text{Eq. 7})$$

Previsión categórica

Para la previsión categórica se calculan los estadísticos exactitud (A), bias (B), probabilidad de detección (POD), ratio de falsas alarmas (FAR) e índice crítico de éxito (CSI) basado en las superaciones de umbral observadas, las no- superaciones versus las superaciones previstas por el modelo. Si llamamos a: previsión de una superación que no ocurrió; b: previsión de una superación que ocurrió; c: previsión de una no-superación que no ocurrió; y d: no-previsión de una superación que ocurrió, podemos definir los parámetros anteriormente citados como:

$$A \mid \frac{\begin{matrix} \textcircled{R} \\ \textcircled{C} \\ \text{TM} \end{matrix} \frac{b \ 2 \ c}{a \ 2 \ b \ 2 \ c \ 2 \ d}}{\Delta 100\%} \quad (\text{Eq. 8})$$

$$\text{CSI} \mid \frac{\begin{matrix} \textcircled{R} \\ \textcircled{C} \\ \text{TM} \end{matrix} \frac{b}{a \ 2 \ b \ 2 \ d}}{\Delta 100\%} \quad (\text{Eq. 9})$$

$$\text{POD} \mid \frac{\begin{matrix} \textcircled{R} \\ \textcircled{C} \\ \text{TM} \end{matrix} \frac{b}{b \ 2 \ d}}{\Delta 100\%} \quad (\text{Eq. 10})$$

$$B \mid \frac{\begin{matrix} \textcircled{R} \\ \textcircled{C} \\ \text{TM} \end{matrix} \frac{a \ 2 \ b}{b \ 2 \ d}}{\Delta 100\%} \quad (\text{Eq. 32})$$

$$\text{FAR} \mid \frac{\begin{matrix} \textcircled{R} \\ \textcircled{C} \\ \text{TM} \end{matrix} \frac{a}{a \ 2 \ b}}{\Delta 100\%} \quad (\text{Eq. 33})$$

Así, A indica el porcentaje de resultados del modelo que predijeron una superación o una no superación. El estadístico CSI proporciona una medida de la bondad en la previsión de superaciones, sin tener en cuenta el acierto en la previsión de no superaciones. El parámetro POD es similar al CSI en tanto que mide el número de veces que un modelo predijo una superación cuando tal superación ocurrió realmente. Las medidas de B indican si las superaciones diagnosticadas por el modelo se encuentran por debajo ($B < 1$) o por encima ($B > 1$) de los valores medidos. Por último, FAR representa el número de veces que el modelo predijo una superación que no ocurrió.

REFERENCIAS:

Eder, B. Kang, D., Mathur, R., Yu, S., Schere, K., 2006. An Operational Evaluation of the Eta-CMAQ air quality forecast model. *Atmospheric Environment*, In Press.

Kang, D., Eder, B.K. and Schere, K.L., 2003. The evaluation of regional-scale air quality models. In: *Preprints of 26th NATO/CCMS International Technical Meeting on Air Pollution Modeling and Its Application*. Istanbul, Turkey, pp. 404-411.

Kang, D., Eder, B., 2004. An operational evaluation of the Eta-CMAQ air quality forecast model. In: 2004 Models-3 User's Workshop Conference, Research Triangle Park, NC, USA.

US EPA, 1991. Guideline for Regulatory Application of the Urban Airshed Model. US EPA Report No. EPA-450/4-91-013. Office of Air and Radiation, Office of Air Quality Planning and Standards, Technical Support Division. Research Triangle Park, North Carolina, US.

US EPA, 2005. Guidance on the use of models and other analyses in attainment demonstrations for the 8-hour ozone NAAQS. US EPA Report No. EPA-454/R-05-002. Office of Air Quality Planning and Standards. Research Triangle Park, North Carolina, US, October 2005, 128 pp.

CAPÍTULO 4

INVENTARIO DE MODELOS UTILIZADOS PARA CALIDAD DEL AIRE

Responsable:

Fernando Martín, CIEMAT.

Índice

1. MODELOS EPA

1.1 Modelos de dispersión recomendados

1.2 Modelos alternativos.

1.3 Modelos Fotoquímicos.

2. SISTEMA DE DOCUMENTACION DE MODELOS DE LA AGENCIA EUROPEA DE MEDIO AMBIENTE

2.1 Información general

2.2 Sistema de búsqueda estructurada de modelos

3. INVENTARIO DE MODELOS DE LAS ACCIONES COST 728 Y 732

4. OTROS MODELOS

4.1 Modelos meteorológicos.

4.2 Modelos de dispersión.

4.3 Modelos fotoquímicos.

4.4 Modelos para partículas.

4.5 Modelos de emisiones.

4.6 Otros modelos o técnicas.

5. POSIBLES CONTENIDOS DE UNA FUTURA WEB ESPAÑOLA SOBRE MODELIZACIÓN ATMOSFÉRICA

6. REFERENCIAS

7. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

8. PAGINAS WEB

ANEXO I

ANEXO II

1. MODELOS EPA

1.1 MODELOS DE DISPERSIÓN RECOMENDADOS POR LA EPA

La Agencia de Medio Ambiente de Estados Unidos (EPA –Environmental Protection Agency) establece una serie de modelos recomendados para abordar distintos problemas de calidad del aire. El proceso de selección de modelos recomendados es muy riguroso, aunque lento, de tal forma que los modelos son sometidos a pruebas exhaustivas para verificar su capacidad de reproducir los procesos atmosféricos (evaluación frente a datos de experimentos de campo) y su validez frente a otros modelos (intercomparación con otros modelos). Aunque en muchos casos, estos modelos no sean los más actuales y, por tanto, quizá sean superados por otros modelos más recientes, sí se puede afirmar que tienen una fiabilidad contrastada.

A continuación se muestran los modelos recomendados por la EPA. Para más detalles y para descargar los programas ejecutables, manuales y casos ejemplos de dichos modelos, se recomienda visitar la página web (<http://www.epa.gov/ttn/scram/>):

AERMOD Modeling System

Es un modelo de penacho en estado estacionario que incorpora la dispersión basada en la estructura y conceptos de escalado de la turbulencia en la capa límite planetaria, incluyendo el tratamiento de fuentes de área, de volumen y puntuales (chimeneas) y terrenos complejos y simples. Incorpora los algoritmos del modelo PRIME (Plume Rise Model Enhancements) para evaluar los efectos dinámicos de edificios en las inmediaciones de las fuentes.

BLP (Bouyant Line and Point Source Model)

Modelo de penacho gaussiano para modelizar emisiones industriales en chimeneas donde la sobreelevación de penacho y el downwash son importantes. Diseñado espacialmente para tratar problemas de dispersión de contaminantes emitidos por plantas de reducción del aluminio.

CALINE-3

Modelo de penacho Gaussiano de estado estacionario diseñado para estimar la contaminación atmosférica debida a carreteras, autopistas, cruces, puentes, etc en un terreno poco complejo.

CAL3QHC/CAL3QHCR

CAL3QHC es un modelo para CO basado en el CALINE3 adecuado para calcular concentraciones en zonas de atascos y hot spots con un modelo de tráfico para calcular retrasos y atascos que ocurren en cruces. CAL3QHCR es una versión más refinada de CAL3QHC que requiere datos meteorológicos locales.

CALPUFF

Modelo Lagrangiano de nubes aisladas que simula el efecto de las condiciones meteorológicas (simuladas con CALMET) variando en el tiempo y en el espacio sobre el transporte, transformación y eliminación del contaminantes. Puede aplicarse a escalas desde decenas a centenas de Kms. Incluye algoritmos para tratar procesos a escala subgrid, así como, efectos a gran escala.

CTDMPLUS

Modelo Gaussiano de dispersión en terreno complejo para focos puntuales aplicable a todo tipo de condiciones de estabilidad atmosférica.

OCD (Offshore and Coastal Dispersion Model)

Modelo de penacho Gaussiano rectilíneo desarrollado para determinar el impacto de emisiones costeras y mar adentro debidas a fuentes puntuales, lineales o de área. Incorpora los efectos que sufre el penacho al cruzar la línea de costa. Necesita datos meteorológicos horarios en emplazamientos mar adentro y tierra adentro.

1.2 MODELOS DE DISPERSIÓN ALTERNATIVOS DE LA EPA

Además, la EPA ofrece una lista de modelos alternativos a los anteriores que pueden ser utilizados en aplicaciones reglamentarias con una justificación clara según el caso a tratar. A continuación se listan algunos más representativos:

ADAM (Air Force Dispersion Assessment Model)

Es un modelo de caja y Gaussiano que incorpora termodinámica, química, transferencia de calor, aerosoles y efectos de gases densos. Puede tratar escenarios de emisiones continuas e instantáneas, fuentes de área o puntuales, emisiones desde depósitos presurizados o no, tratamiento de contaminantes en fase vapor y líquida. Este modelo resulta útil para su uso en caso de escapes accidentales en industrias químicas.

ADMS-3 (Atmospheric Dispersion Modeling System)

Este es un modelo británico de la compañía CERC que ha conseguido ser incluido en la lista de modelos alternativos. Salvo en ciertas circunstancias, no es un modelo de uso gratuito. Se trata de un modelo de dispersión avanzado para calcular concentraciones de contaminantes emitidos de forma continua desde focos puntuales, fuentes de línea (carreteras) y fuentes de área o tridimensionales. También puede usarse para emisiones discretas desde un foco puntual. Incluye algoritmos para tratar los principales efectos debidos a edificios, terreno complejo, depósito húmedo y seco, sedimentación gravitacional, fluctuaciones rápidas de concentración, reacciones químicas, decaimiento radiactivo y dosis gamma, sobreelevación del penacho, emisiones en chorro, diversos rangos de promediado en tiempo para los resultados (desde minutos a un año), procesador meteorológico, etc.

AFTOX

AFTOX es un modelo de dispersión Gaussiano para emisiones elevadas o a nivel del suelo, continuas o instantáneas de un líquido o un gas desde focos puntuales o de área. Proporciona mapas de concentración a nivel del suelo o un punto especificado o la máxima concentración a una altura e instante dados.

DEGADIS

DEGADIS simula la dispersión atmosférica de un gas denso emitido a nivel del suelo desde una fuente de área. Trata emisiones con momento cero sobre terreno llano sin pendientes. Incorpora los efectos de corrientes de gravedad, entrada de aire en la nube de gas, etc.

HYROAD (HYbrid ROADway Model)

Este modelo incorpora módulos históricos que simulan los efectos del tráfico, emisiones y la dispersión. El módulo de tráfico es un modelo de transporte a microescala que simula el movimiento de vehículos individuales. El módulo de emisión usa distribuciones de velocidad del módulo de tráfico para determinar factores de emisión. La distribución espacial y temporal de emisiones está basada en simulaciones de operaciones con vehículos. Considera segmentos de carretera de 10 metros de largo y las estimaciones de velocidad y aceleración son utilizadas tanto para cálculo de emisiones como para estimar flujos y turbulencia inducidos. El módulo de dispersión consiste en un modelo Lagrangiano de nubes (puffs). Utiliza datos de viento y estabilidad deducidos de las salidas del modelo tráfico y reproduce las características de la dispersión muy cerca de la carretera. Proporciona concentraciones horarias de CO y otros contaminantes gaseosos, partículas y compuestos tóxicos.

ISC3 (Industrial Source Complex Model)

Modelo de penacho Gaussiano en estado estacionario que puede usarse para evaluar las concentraciones de contaminantes emitidos desde una gran variedad de fuentes de tipo industrial. Este modelo tiene en cuenta el depósito seco y sedimentación de partículas, downwash, fuentes puntuales, lineales, de área y de volumen, sobreelevación de penachos, separación de fuentes, ajuste al terreno. ISCST es la versión para corto plazo mientras ISCLT lo es para largo plazo.

Este modelo ha sido muy utilizado en España en estudios de impacto ambiental. En la Junta de Andalucía, se ha utilizado también como apoyo en la evaluación de la calidad del aire.

ISC-PRIME es una mejora del modelo ISCST, que incorpora el “building downwash”.

PLUVUEII

Modelo para estimar la reducción de visibilidad y decoloración atmosférica causada por penachos resultantes de emisiones de partículas, óxidos de nitrógeno y óxidos de azufre emitidos desde una única fuente (puntual o de área). El modelo predice el transporte, difusión, reacciones químicas, efectos ópticos y depósito.

SCIPUFF (Second-order Closure Integrated PUFF Model)

Es un modelo Lagrangiano de nubes (puffs) gaussianas que simula la dispersión proporcionando la distribución tridimensional de contaminantes y su evolución. Proporciona una predicción de la varianza estadística en los campos de concentración resultantes debido a fluctuaciones aleatorias del campo de vientos.

SDM (Shoreline Dispersion Model)

Es un modelo de dispersión de múltiples fuentes utilizado para determinar las concentraciones a nivel del suelo debidas a emisiones elevadas puntuales (chimeneas) y estacionarias situadas cerca de la costa.

SLAB

SLAB es otro modelo para gases más densos que el aire adecuado para accidentes industriales. Resuelve las ecuaciones unidimensionales de momento, conservación de masa, especies y energía, y la ecuación de estado. Puede tratar casos de chorros de gas a nivel del suelo y en altura, charcos líquidos evaporando gas denso y emisiones instantáneas.

1.3 MODELOS FOTOQUÍMICOS EPA

CMAQ (Community Multi-scale Air Quality)

Este modelo ha sido desarrollado por la US EPA en 1999 (Byun et al., 1998) y se encuentra mantenido por un programa específico de la misma agencia desde entonces en el CMAS (Community Modelling and Análisis System). Es de código abierto. Incluye capacidades muy acordes con el estado actual del conocimiento para simular a escalas desde urbana a nacional múltiples aspectos de la calidad del aire, tales como, ozono troposférico, partículas finas, compuestos tóxicos, depósito ácido y degradación de la visibilidad.

CAMx (Comprehensive Air quality Model with extensions)

El modelo CAMx es un modelo euleriano de dispersión que permite la modelización integrada de los distintos mecanismos de dispersión fotoquímica y transporte de los contaminantes en fase gaseosa y particulada. El modelo trata una amplia variedad de contaminantes inertes y reactivos, incluyendo ozono, partículas, $PM_{2.5}/PM_{10}$ orgánico e inorgánico, mercurio y diversos compuestos tóxicos. para distintos niveles de resolución espacial, con posibilidad de aplicación desde problemas de contaminación urbana, hasta modelización a una escala continental.

En la actualidad se trata de un código abierto que se encuentra paralelizado y permite el anidamiento de mallas telescópicas, optimizándose así el tiempo de cómputo sin disminuir la resolución espacial y temporal de los resultados del modelo.

Es capaz de tratar la dispersión y la química de penachos (emitidos desde focos puntuales) cuyo tamaño es inferior a una celdilla de cálculo (escala subgrid) hasta que estos penachos crecen y son comparables a las celdillas de cálculo. Incorpora un método muy interesante para rastrear o seguir unas emisiones determinadas, lo que puede ser útil para estimar la contribución de un foco a la contaminación en un punto.

REMSAD (Regional Modeling System for Aerosols and Deposition)

REMSAD calcula las concentraciones de contaminantes inertes y reactivos a escala nacional. Incorpora procesos relevantes que afectan a la dispersión de partículas, compuestos ácidos, mercurio, etc.

UAM-V (Urban Airshed Model Variable Grid)

Este modelo es un clásico dentro de los modelos fotoquímicos, ya que sus primeras versiones datan de los años 70 y ha sido utilizado para un gran número de estudios orientados al ozono. Es un modelo tridimensional diseñado para calcular las concentraciones de contaminantes inertes y reactivos simulando un amplio espectro de procesos físicos y químicos en la atmósfera. Se utiliza habitualmente para estudios de episodios de alta contaminación, es decir, para periodos de tiempo de unas pocas horas a pocos días.

2. SISTEMA DE DOCUMENTACION DE MODELOS DE LA AGENCIA EUROPEA DE MEDIO AMBIENTE

2.1 INFORMACIÓN GENERAL

Frente a la política de Estados Unidos, donde su Agencia de Medio Ambiente (US EPA), tras un procesos de evaluación exhaustivos, establece unos modelos oficiales de su uso recomendable para distintas aplicaciones, en Europa, en los últimos años, la Agencia Europea de Medio Ambiente (EEA – European Environment Agency) (<http://www.eea.eu.int/>) ha desarrollado una base de datos de modelos aplicados a distintos aspectos de la calidad del aire a través del European Topic Centre on Air and Climate Change. Esta base de datos es conocida como Model Documentation System (Sistema de Documentación de Modelos) y se puede acceder a ella por internet (<http://air-climate.eionet.eu.int/databases/MDS/index.html>). El objetivo es proveer una guía a los usuarios de modelos en lo referente a la selección del modelo o modelos más apropiados para cada aplicación concreta. Los desarrolladores de modelos envían información sobre su modelo a dicho sistema, si bien hay que hacer saber que no todos los modelos habitualmente utilizados o desarrollados en Europa están incluidos en dicha base de datos, ya que no existe obligación para los desarrolladores de incluir sus modelos en dicha base de datos.

Accediendo al Model Documentation System, se pueden realizar búsquedas:

- ≠ estructuradas, respondiendo a una serie de preguntas clave, o
- ≠ sin estructurar, indicando palabras clave adecuadas.

También se puede ver el catálogo completo, que incluye casi 100 modelos. Para cada uno existen dos tipos de descripciones:

- ≠ Breve, mostrando el tipo de contaminantes tratados, su aplicación, tipo de resultados, tipo de fuentes y emisiones tratadas, escala espacial, tipo de simulaciones, procesos considerados y tipo de computadora a utilizar.
- ≠ Extensa, donde se muestra en detalle aspectos más técnicos y complementarios del modelo incluyendo, entre otros, características técnicas, referencias bibliográficas, manuales,

información sobre los ejercicios de evaluación a que ha sido sometido el modelo, disponibilidad (público o compra), etc.

2.2 SISTEMA DE BÚSQUEDA ESTRUCTURADA DE MODELOS

El Sistema de Documentación de Modelos de la Agencia Europea de Medio Ambiente posee en su página web una potente herramienta de búsqueda estructurada de modelos (<http://pandora.meng.auth.gr/mds/wizard1.php>). Esta permite buscar modelos adecuados en función del problema de calidad del aire a tratar de una forma muy estructurada. En la versión existente en 2005, al entrar en la opción de búsqueda estructurada, se plantean opciones de forma secuencial:

1. Extensión del área de estudio (local, regional, continental o global).
2. Problema a tratar (cambio climático, reducción de ozono, ozono troposférico, acidificación, eutrofización, smog, gases tóxicos, calidad del aire urbano, contaminantes industriales, emergencias nucleares o químicas).
3. Tipo de aplicación a realizar con el modelo (cumplimiento de la legislación, apoyo al diseño de políticas medioambientales, planes de emergencia, información al público e investigación científica):
4. Tipo de modelo (Gaussiano, semi-empírico, Euleriano, Lagrangiano, químicos, orientados al receptor, estocásticos):
5. Tipo de estudio (estadístico, largo plazo, episódico, tiempo real)
6. Tipo de fuente (chimeneas, carreteras, superficies, volúmenes, inventarios, múltiples, continuas, esporádicas, etc)
7. Tipo de procesos, datos de salida, contaminante, exigencias computacionales, etc.

3. INVENTARIO DE MODELOS DE LAS ACCIONES COST 728 Y 732

Dentro de las actividades de las acciones europeas COST 728 (Enhancing mesoscale meteorological modelling capabilities for Air pollution and dispersion applications) y 732 (Quality Assurance and Improvement of Micro-Scale Meteorological Models), se está elaborando un inventario de modelos atmosféricos, tanto para meteorología como para dispersión y química, desarrollados y/o utilizados por diversos grupos de investigación, empresas y administraciones en distintos países europeos (<http://www.mi.uni-hamburg.de/index.php?id=539>). Es un inventario bastante completo, aunque no tan completo y detallado como el Sistema de Documentación de Modelos (MDS, Model Documentation System) de la Agencia Europea de Medio Ambiente. Es interesante la clasificación que ofrece de los modelos en virtud de su escala espacial de trabajo y de su orientación (meteorología o dispersión y química). Además, ofrece una descripción sintética pero bastante detallada de cada modelo. En el COST 615 (Database, monitoring and modelling of urban air pollution) se realizó un inventario de modelos y datos que sirvieran para estudiar la calidad de aire en las ciudades (Schatzmann et al., 1997)

En el anexo I, se muestran dos tablas con el listado completo de los modelos incluidos en el COST 728 y 732 por orden alfabético y según sus escalas espaciales y objeto de los mismos.

4. OTROS MODELOS

A continuación, se describen otros modelos, la mayor parte de los cuales están siendo utilizados en España por universidades, centros de investigación y en departamentos de medio ambiente de grandes empresas y administraciones (nacional, regional y local).

4.1 MODELOS METEOROLÓGICOS

MM5 (<http://www.mmm.ucar.edu/mm5/>).

Se trata de dos modelos meteorológicos. Históricamente, el primero fue MM5 que es un modelo de pronóstico meteorológico que ha sido desarrollado conjuntamente por la Universidad de

Pennsylvania State y el National Centre for Atmospheric Research de Estados Unidos (Dudhia et al, 2001). Está basado en las ecuaciones primitivas y no hidrostático. Utiliza un sistema de coordenadas vertical que sigue el terreno. Permite simular y predecir las circulaciones desde la microescala a la escala sinóptica, pasando por la mesoscala. Permite usar mallas anidadas. Incluye física de nubes, diversas formulaciones del suelo, capa límite planetaria y radiación. Es un modelo de dominio público y que está en continua evolución con la contribución de muchas universidades y centros de investigación del mundo. En el mundo su uso está muy extendido. En España, en el año 2004 se creó una Red Ibérica de Usuarios de MM5 (<http://redibericamm5.uib.es/>).

WRF (<http://www.wrf-model.org/index.php>)

WRF (Skamarock et al., 2001) es un modelo que comparte muchas cosas de MM5 pero que está programado de una forma mucho más estructurada y modular permitiendo mejoras y nuevas incorporaciones de una forma más simple. Existe dos versiones: WRF-ARW, que es una nueva versión mejorada de MM5, y WRF-NMM lo es a su vez del modelo meteorológico ETA.

Al igual que MM5, WRF son modelos de dominio público y la comunidad de desarrolladores y usuarios es muy grande en todo el mundo. Estos modelos están siendo muy utilizados junto con diversos modelos de dispersión.

RAMS (Pielke et al. 1992 y Lyons et al. 1995).

Desarrollado por la Universidad de Colorado State en Estados Unidos. Es un modelo no-hidrostático que incluye diferentes opciones para parametrizar los procesos físicos que rigen la dinámica atmosférica. Este modelo tiene acoplado un modelo híbrido de dispersión de partículas (HYFRACT) y puede usar diferentes configuraciones de mallas anidadas "2-way", es decir, con intercambio y retroalimentación bi-direccional de la información meteorológica resuelta en las diferentes escalas meteorológicas (desde la escala global hasta la local, pasando por la mesoscala). Se trata de un código ampliamente utilizado y contrastado por la comunidad científica internacional, en continua evolución y disponible en versión paralelizada y en código abierto.

RSM (Regional Spectral Model)

Este modelo fue desarrollado originalmente por el NCEP de los EE.UU. y ha sido utilizado desde mediados de los años 90 para proporcionar predicciones de alta resolución en entornos regionales. Este modelo está completamente desarrollado mediante métodos espectrales que proporcionan una gran estabilidad numérica a las soluciones.

CALMET (Scire et al., 1999).

Es un modelo de diagnóstico meteorológico que forma parte de un sistema de modelos junto con el CALPUFF. Está disponible en la página web de la EPA. Consta de dos módulos principales: módulo de campo de vientos y módulo de capa límite. Permite obtener estimaciones de campos de viento, temperatura, turbulencia, en diversos niveles sobre el suelo, así como, altura de capa de mezcla, precipitación, etc a partir de datos registrados en estaciones meteorológicas en superficie y sondeos aerológicos.

MEMO (Moussiopoulos et al., 1997).

Desarrollado en la Universidad de Tesalonika (Grecia). Muy utilizado en estudios de calidad del aire en Atenas. Este modelo ha formado parte del germen inicial del modelo OPANA. El GMSMA incorporó en modo on-line la química CBM-IV resuelta numéricamente con el método SMVGEAR desarrollado por el prof. Jacobson en 1994.

TVM (Topography Vorticity-mode Mesoscale) (Thunis y Clappier, 2000)

TVM tiene su origen en el modelo URBMET (Bornstein et al., 1987) que fue desarrollado en la Universidad de San José State (USA). Este era un modelo hidrostático para terreno llano basado en las ecuaciones de vorticidad para simular circulaciones a mesoscala incluyendo brisas y efectos urbanos. Con posterioridad, Schayes y Thunis (1990) en la Universidad Católica de Lovaina (Bélgica) y JRC (Ispra-Italia) reformularon el modelo para su aplicación a terreno complejo

y en la segunda mitad de los noventa se desarrolló una versión no hidrostática (Thunis 1995, Thunis y Clappier, 2000).

PROMES (Gaertner et al., 1993).

Desarrollado en la Universidad Complutense de Madrid y en la Universidad de Castilla-La Mancha.

ARPS (Xue et al, 2001).

Desarrollado en la Universidad de Oklahoma. Este modelo esta siendo utilizado en la predicción del tiempo en Galicia.

MASS (Mesoscale Atmospheric Simulation System) (Zack and Kaplan, 1987)

Utilizado por la Universidad de Barcelona. Hace predicciones operativas del tiempo.

HIRLAM (High Resolution Limited Area Model) (Undén et al., 2002).

Es el modelo que utiliza el Instituto Nacional de Meteorología en la predicción del tiempo.

MIMO (Microscale Model, Universidad de Karlsruhe (Alemania) y Universidad de Tesalónica (Grecia)

Este modelo es un modelo de cálculo de dinámica de fluidos desarrollado bajo la dirección del Prof. N. Moussiopoulos (U. Thessaloniki, Greece) que incorpora un módulo de transporte y permite simulaciones de elevada resolución (metros). Se puede aplicar a muchos dominios, en particular, en entornos urbanos.

4.2 MODELOS DE DISPERSIÓN

MELPUFF (Mesoscale Lagrangian Puff dispersion model).

Ha sido desarrollado en CIEMAT (<http://www.ciemat.es>) (Martín et al, 2002). Es un modelo Lagrangiano de nubes Gaussianas aplicable a contaminantes no reactivos no densos. Incorpora módulos de cálculo del depósito de contaminantes, especialmente partículas. Considera el efecto de edificios. Puede ser utilizado a microescala y a mesoscala (hasta 1000 Km). Utiliza las salidas de los modelos CALMET y TVM.

SLP-2D (Street Lagrangian Particles" en 2D).

Es un modelo de partículas lagrangiano desarrollado en el CIEMAT para el estudio de la dispersión de partículas dentro de calles, aunque puede ser aplicado a situaciones de campo abierto (Santiago y Martín, 2005 y Santiago, 2006). La concentración de contaminante se simula mediante un gran número de partículas que son liberadas dentro del flujo atmosférico. Estas partículas parten desde la localización de las fuentes y a cada una se le asigna una masa dependiendo de la tasa de emisión de cada fuente. Ha sido incluido en el Model Documentation System de la Agencia Europea de Medio Ambiente.

OSPM (Operational Street Pollution Model).

Es un modelo de street canyon, que puede ser utilizado para evaluar la contaminación debida al tráfico en calles Berkowicz (2000) y Berkowicz et al (2002). Este modelo está siendo utilizado en Dinamarca, país donde se desarrolló, y en varias ciudades y agencias medio ambientales de países europeos. Este modelo tiene una versión en entorno windows muy fácil y rápido de usar.

RIMPUFF (Thykier-Nielsen et al., 1998).

Modelo Lagrangiano de nubes gaussianas (puffs) desarrollado en RISØ, Dinamarca.

STACKS (Erbrink, 1995).

Modelo de penacho adecuado para tratamiento de la dispersión de contaminantes emitidos desde chimeneas en terrenos llanos. Desarrollado por la Universidad Libre de Amsterdam.

FLEXPART (Stohl, 1999).

El modelo lagrangiano de dispersión FLEXPART, fue desarrollado en la década de los años 90 (Stohl, 1999) y evaluado mediante 40 simulaciones empleando los datos de diferentes campañas experimentales empleando trazadores atmosféricos² (Stohl et al., 1998).

El modelo FLEXPART está preparado para ser acoplado al modelo global de predicción meteorológica operado por el ECMWF³. No obstante, Wotawa y Stohl (2000) adaptaron el modelo (versión 3.1) para ser ejecutado conjuntamente con un modelo no-hidrostático. Esta versión del modelo FLEXPART es susceptible de diagnosticar el transporte de contaminantes en escalas que oscilan desde la global hasta la local.

HYPACT (Tremback et al., 1993)

El modelo de dispersión HYPACT (HYbrid Particle And Concentration Transport model) es un modelo híbrido (Lagrangiano-Euleriano) acoplado al modelo meso-meteorológico RAMS (Pielke et al., 1992).

² Las campañas experimentales que sirvieron para validar este modelo lagrangiano de dispersión de contaminantes atmosféricos, son: CAPTEX (Cross-Appalachian Tracer Experiment), el ANATEX (Across North America Tracer Experiment) y el ETEX (European Tracer Experiment).

³ ECMWF :European Center for Medium-Range Weather Forecasts.

4.3 MODELOS FOTOQUÍMICOS

CHIMERE (Menut et al., 2000; Vautard, et al., 2000a y b).

Es un modelo multiescala diseñado principalmente para proporcionar predicciones diarias de ozono, aerosoles y otros contaminantes y para realizar simulaciones a largo plazo para diversos escenarios de emisiones. Es válido para diversas escalas desde grandes escalas (varios miles de kilómetros) hasta escalas urbanas (100-200 Km) con resoluciones espaciales de 1 ó 2 Km hasta 100 Km. Puede utilizar diversos mecanismos químicos, desde los más simples a los más complejos considerando o no aerosoles. Como predicción meteorológica puede usar directamente las predicciones generadas por el modelo MM5. Actualmente está siendo utilizado en diversas regiones de Francia y también como herramienta de predicción operacional de la calidad del aire en la Europa Occidental.

MARS (Moussiopoulos et al, 1997).

Desarrollado en la Universidad de Tesalonika (Grecia) y muy utilizado en estudios de calidad del aire en Atenas.

OPANA (San José et al, 1997)

El modelo OPANA (San José et al., 1997) (Operacional Atmospheric numerical pollution model for urban and regional Areas) fue desarrollado por el GMSMA de la Facultad de Informática de la Universidad Politécnica de Madrid en 1995. Es un modelo on-line que se basa en el modelo MEMO (adaptado) y un módulo químico (CHEMA) que incluye el sistema SMVGEAR. Tiene la particularidad de que utiliza el transporte resuelto en el modelo meteorológico no-hidrostático tridimensional (MEMO) e integra la química como parte de la meteorología (a semejanza del WRF-Chem). El sistema incluye un sofisticado sistema de visualización desarrollado en Tcl/Tk para ser ejecutado por el usuario de forma cómoda y sencilla. Incluye el modelo EMIMA/EMIMO (San José et al., 2003) para la producción de emisiones. Está integrado en el Model Documentation System de la European Environmental Agency (EEA). (<http://pandora.meng.auth.gr/mds/strquery.php>). El modelo OPANA se ha implementado – con las debidas adaptaciones y versiones – en diferentes estudios y – sobre todo – en sistemas de predicción operacionales diarios en tiempo-real para entornos urbanos y regionales. Produce estimaciones de las concentraciones de contaminantes atmosféricos en modo predictivo con

un horizonte temporal de 48 – 72 horas. Ver <http://artico.lma.fi.upm.es>. La última versión del sistema OPANA incluye MM5-CMAQ.

WRF-chem (Grell et al. 2005)

Es un sistema acoplado de un modelo de dispersión fotoquímico y el modelo meteorológico WRF. El modelo de dispersión tiene los siguientes módulos:

- € Transporte
- € Depósito seco
- € Química en fase gas basado en el mecanismo químico RADM2.
- € Emisiones biogénicas
- € Aerosoles
- € Química de aerosoles.

TVM-Chem (Clappier et al, 2000, Palacios et al, 2002 a y b)

Es un sistema acoplado de un modelo de dispersión fotoquímico y el modelo meteorológico TVM. Se basa en el modelo CIT e incorpora los mecanismos químicos LCC, RACM y EMEP. Contribución a su desarrollo por parte de CIEMAT.

CIT (McRae et al, 1982)

Modelo Euleriano capaz de predecir la distribución espacial y temporal de contaminantes inertes y reactivos. Incorpora el mecanismo SAPRC99 y trata la dispersión y depósito de contaminantes gaseosos.

4.4 MODELOS PARA TRANSPORTE DE POLVO NATURAL

BSC-DREAM

El Dust REgional Atmospheric Modeling System DREAM (Nickovic et al., 2001, Pérez et al, 2006a, 2006b) es un modelo diseñado para simular o predecir el ciclo atmosférico del polvo mineral. En un marco euleriano, resuelve la ecuación no lineal en derivadas parciales para la continuidad en masa del polvo. DREAM está completamente acoplado como una de las ecuaciones de pronóstico en el modelo meteorológico NCEP/ETA. La ecuación de concentración simula los procesos más importantes del ciclo del polvo. Durante la integración, el cálculo de los flujos de inyección de polvo se realiza en las celdas del modelo declaradas como desiertos. Una vez inyectado en la atmósfera, el polvo es conducido por las siguientes variables del modelo: turbulencia en las primeras fases del ciclo cuando el polvo se eleva desde el suelo hasta niveles más altos; vientos en las fases posteriores cuando el polvo se transporta a otras zonas; y finalmente, por procesos termodinámicos, precipitación y propiedades del suelo se deposita por vía seca o húmeda sobre la superficie. DREAM proporciona predicciones operacionales en el Mediterráneo y en las Islas Canarias y parte oriental de Asia en los últimos años (actualmente en el BSC-CNS: <http://www.bsc.es/projects/earthscience/DREAM/>).

4.5 MODELOS DE EMISIONES

SMOKE

Sparse Matrix Operator Kernel Emissions (SMOKE) es un sistema de procesamiento de emisiones diseñado para crear emisiones horarias de un amplio número de contaminantes (incluyendo partículas y compuestos tóxicos) en una malla para servir de entrada a una extensa variedad de modelos de calidad del aire (CMAQ, REMSAD, CAM_x y UAM). SMOKE puede tratar emisiones de focos puntuales, de área, biogénicos y móviles (en carretera y fuera de carretera). Usa el sistema de emisiones biogénicas BEIS2 y BEIS3 y tiene incorporado el modelo de emisiones en carretera MOBILE6. (<http://cf.unc.edu/cep/empd/products/smoke/index.cfm>).

MOBILE6

Es software para modelizar las emisiones producidas por vehículos. Es un modelo de factor de emisiones de HC, CO, NO_x, CO₂, PM y compuestos tóxicos emitidos por coches, camiones, motocicletas bajo condiciones diversas. (<http://www.epa.gov/otag/m6.htm>)

COPERT III

Es un programa de MS Windows para el cálculo de emisiones de contaminantes del sector de transporte en carretera. Su desarrollo ha sido financiado por la Agencia Europea de Medio Ambiente en el marco de las actividades del European Topic Centre on Air and Climate Change. Diseñado originariamente para su uso por parte de expertos nacionales para estimar emisiones anuales nacionales, en la actualidad está disponible de forma gratuita para uso de investigación y académico. COPERTIII es parte de programa CORINAIR. COPERT III es la tercera actualización de la metodología inicial (COPERT 85, en 1989). COPERT III estima las emisiones de todos los contaminantes regulados (CO, NO_x, COV y PM) emitidos por diferentes categorías de vehículos (coches de pasajeros, vehículos ligeros y pesados, ciclomotores y motocicletas) así como las emisiones de CO₂ en base al consumo de combustible. Además, se calculan las emisiones de otros compuestos como CH₄, N₂O, NH₃, SO₂, metales pesados, HAP (hidrocarburos aromáticos policíclicos) y COP (contaminantes orgánicos persistentes). Considera emisiones en caliente, en frío y las producidas por evaporación de combustible. Aunque está pensado para emisiones nacionales anuales, la metodología puede aplicarse a casos de una mayor resolución espacial y temporal (1x1 Km² y 1 hora, respectivamente). Tiene además un módulo separado para estimar las emisiones de escapes de vehículos y motores fuera de carretera. (<http://lat.eng.auth.gr/copert/>)

CAMO (Cellular Automata Model) (Universidad Politécnica de Madrid)

CAMO es un modelo de simulación del tráfico vehicular para entornos urbanos de gran precisión y que se fundamenta en los modelos autómatas celulares. Permite generar emisiones en un entorno urbano con gran detalle para poder ser utilizadas con sistemas CFD (MIMO).

EMICAT2000, EMIVAL 2000 (Parra, 2004 y Arévalo, 2005)

Modelo de emisiones desarrollado por la Universidad Politécnica de Cataluña que permite obtener emisiones de un amplio número de contaminantes con una alta resolución espacial (1 km²) y temporal (1 hora) muy necesaria para su uso con los modelos de dispersión. Ha sido utilizado para calcular emisiones en Cataluña, Valencia y se está utilizando para obtener emisiones de alta resolución espacial y temporal para toda España. Será una parte clave del futuro sistema de predicción de la calidad del aire en España (CALIOPE).

EMIMO (San José, et al.2003)

Este modelo ha sido desarrollado por el Grupo de Modelos y Software para el Medio Ambiente de la Facultad de Informática de la Universidad Politécnica de Madrid. Sucesor del modelo EMIMA (EMISSIONS MADRID), desarrollado en el año 1995.

EMIHUE2003

Modelo de emisiones desarrollado por la Fundación CEAM que incluye las emisiones tanto de origen biogénico como antropogénico, con una resolución temporal horaria y una resolución espacial de orden de 1 km. Ha sido utilizado para estimar las emisiones en el entorno de Huelva-Sevilla. Especialmente diseñado para servir de entrada a un modelo fotoquímico de última generación.

MACTRA y MICTRA (Palacios, 2001; Palacios et al. 2001, Palacios y Martín, 2002)

Modelos de estimación de emisiones por tráfico rodado con aproximaciones Top-Down (Mactra) y Bottom-Up (Mictra).

EPS2 / EPS3 (Emission Processing System v2 y v3)

Las herramientas EPS fueron desarrolladas y mantenidas con el objetivo de generar los inventarios de emisiones necesarios para alimentar los modelos fotoquímicos de la US-EPA (United State Environmental Protection Agency), inicialmente para el modelo UAM (Urban Airshed Model).

El modelo EPS realiza básicamente las siguientes tareas:

- € Normaliza los formatos de las fuentes de emisión asociadas a un territorio.
- € Integra las emisiones de los distintos tipos de fuentes: antropogénicas, biogénicas, fuentes móviles y fuentes extensas.
- € Distribuye las emisiones sobre una retícula regular en función de los algoritmos de distribución creados a partir de características asociadas al territorio: infraestructuras de transporte y comunicación, distribución de la población, usos del suelo.

La ejecución del modelo EPS da como resultado un único archivo que contiene las emisiones asociadas a cada especie contaminante distribuidas, tanto espacialmente como temporalmente,

en el territorio y periodo considerado. Dicho archivo puede ser utilizado como fuentes de datos de entrada para distintos modelos fotoquímicos.

Desde el punto de vista operacional las versiones 2 y 3 de EPS son idénticas, si bien EPS3 amplía el número de contaminantes que pueden ser procesados

WBEIS (World Biogenic Emission Information System)

WBEIS es una herramienta desarrollada de manera conjunta y mundial por un numeroso grupo de científicos, los cuales han recopilado información de los factores de emisión de numerosas coberturas vegetales.

WBEIS utiliza datos de usos del suelo y cobertura vegetal y calcula las respectivas emisiones combinando distintos factores de emisión para cada tipo de vegetación, así como las condiciones ambientales (temperatura y radiación-nubosidad), proporcionando un fichero con las emisiones de COV y NO distribuidas espacial y temporalmente sobre el territorio de estudio y el periodo considerado.

EMME/2 (Transportation Planning System)

EMME/2 es un modelo de tráfico rodado que dispone de un módulo específico para el cálculo de las emisiones asociadas al tráfico.

EMME/2 permite obtener la composición del tráfico para distintos períodos horarios y días tipo a lo largo del año, por ejemplo, laborables - festivos, invierno – verano,... . Asimismo, permite analizar el efecto futuro de los proyectos de carreteras en el área de estudio.

Los datos principales de entrada al modelo son:

- € La red viaria del área de estudio.
- € La distribución del parque de vehículos según distintas categorías.
- € Aforos de tráfico.
- € Matrices de desplazamiento de la población.
- € Factores de emisión para cada contaminante, tipo de vehículo y condiciones de movilidad y operación.

A partir de los datos de entrada el modelo calcula las emisiones de contaminantes debidas al tráfico distribuidas espacialmente sobre una retícula regular.

LANDFILL GAS EMISSIONS MODEL (LANDGEM) (EPA)

Estimación de las emisiones atmosféricas debidas a abocadores de residuos sólidos urbanos. Se basa en una ecuación de decaimiento de primer orden que da las emisiones de contaminantes en función del tiempo (CH_4 y CO_2). <http://www.epa.gov/airprogm/oar/oagps/landfill.html>

La información necesaria para usar en el modelo son:

- € Capacidad total del abocador.
- € Cantidad de residuos depositados acumulados.
- € Factor de generación de metano.
- € Capacidad potencial de generación de metano.
- € Concentración de compuestos orgánicos
- € Años que el abocador ha estado operativo.

MECHANICAL RESUSPENSION (MECH) (EPA)

El programa permite calcular las emisiones fugitivas de polvo en gramos por segundo en carreteras pavimentadas, no pavimentadas, en el manejo de materiales, operaciones de construcción y demolición. Se puede utilizar el programa usando parámetros conocidos (características de las carreteras, vehículos, de material tratado o de las condiciones de demolición o construcción).

WATER8 & CHEMDAT8 (EPA)

Es un modelo analítico para estimar las emisiones de componentes específicos de las aguas residuales y su tratamiento. <http://www.epa.gov/ttn/chief/software.html>

- € composición química de las aguas residuales.
- € concentraciones de los compuestos en el agua.
- € etapas del proceso en la planta de tratamiento.

4.6 OTROS MODELOS O TÉCNICAS

Dentro de este apartado, se muestran algunos ejemplos de utilización de modelos de tipo estadístico u otras técnicas avanzadas que usan información de recogida por las estaciones de medida como base para realización de predicciones y alimentados por variables externas como emisiones o meteorología.

Predicción de ozono mediante redes neuronales en el País Vasco

En el País Vasco, se está implantando un sistema de predicción de ozono con 8 horas de antelación basado en el concepto de redes neuronales. Para ello cuentan con el apoyo de la Universidad del País Vasco. La técnica utilizada se basa en el diseño de sendos perceptrones multicapa que constan de tres capas: la capa de entrada, la capa intermedia y la capa de salida. En la primera capa se introducen las variables de entrada a determinar del modelo (variables de meteorología, ozono y dióxido de nitrógeno registradas hasta 24 horas antes del instante en el que se calcula la predicción). La capa de salida consta de una única neurona (la predicción de ozono a obtener). Mediante la regla de aprendizaje BP (backpropagation) y un proceso de prueba-error se determinará el número de neuronas de la capa intermedia. Para el diseño y puesta en marcha del modelo se precisa una base de datos lo suficientemente amplia como para que el modelo aprenda de los datos recogidos, y garantice la capacidad de generalización de la red. De esta forma, se pretende obtener predicciones de los niveles máximos diarios de ozono allí donde haya estaciones de medida.

Modelización de la concentración máxima de ozono a partir de redes neuronales.

La Consejería de Medio Ambiente de la Junta de Andalucía ha iniciado un proyecto de modelización de la concentración máxima de ozono a partir de redes neuronales artificiales.

La forma actual de actuación de la Consejería es comunicar a la población la ocurrencia de un episodio de superación registrado en algunas de las estaciones de la Red de Vigilancia. De forma inherente, dicha comunicación se realiza una vez que la superación ha tenido lugar (o se está produciendo), por lo tanto, cuando se han sufrido (o se están sufriendo) sus efectos.

Con el modelo de predicción utilizado, el objetivo es conocer de forma anticipada la ocurrencia de un episodio de superación de ozono en algunas de las estaciones de vigilancia. Esta información

puede ser suministrada a la población con la anticipación suficiente para mitigar en la medida de lo posible los efectos derivados de la exposición al ozono.

El modelo tiene un horizonte de predicción de 3 días. Suministra la concentración horaria máxima, la hora a la que dicha superación se producirá y el número de horas que la concentración de ozono se mantendrá por encima del umbral de información a la población ($180 \mu\text{g}/\text{m}^3$). La predicción se ofrece con un intervalo de confianza del 90%, por lo que, además del valor central de dicho intervalo, se suministran unos valores máximos y mínimos entre los que deben encontrarse los estadísticos calculados.

La información meteorológica necesaria para la explotación de la red neuronal se obtiene a partir del Centro Europeo de Predicción a Medio Plazo (ECMWF). Se utilizan dos pasadas diarias, por lo que se obtiene una predicción refrescada cada 12 horas. La ejecución de modelo la realiza el Servicio 24 Horas del Centro de Datos de Calidad Ambiental de la Consejería de Medio Ambiente, que está encargado de la supervisión permanente de las redes de vigilancia. El modelo se convierte así en una herramienta muy importante para llevar a cabo dicha supervisión.

En una primera etapa, las estaciones sobre las que actúa el modelo son las de Aljarafe (Sevilla) y La Orden (Huelva), debido al número de superaciones anuales de ozono que suelen registrar. La evaluación de los resultados del modelo sobre estas estaciones permitirá la ampliación a otras estaciones de la Red de Vigilancia.

Evaluación de la calidad del aire en zonas rurales combinando modelización con captadores difusivos, mediante el apoyo de técnicas GIS. (Lozano et al., 2005)

La Consejería de Medio Ambiente de la Junta de Andalucía ha utilizado técnicas de modelización combinadas con captadores difusivos para evaluar amplias zonas rurales. Para ello, se han realizado medidas con captadores difusivos durante un corto espacio de tiempo (dos meses), con el objetivo de determinar el error que introduce el modelo de dispersión ejecutado simultáneamente. Una vez calculado este error, se realiza la evaluación anual de la zona mediante el modelo de dispersión que ha sido contrastado.

El modelo utilizado ha sido el ISCST (Industrial Source Complex) versión 3 de la agencia norteamericana EPA (Environmental Protection Agency). Puede encontrarse este modelo gratuito, así como una amplia descripción de su uso, en la página web de la EPA (www.epa.gov).

Es necesario conocer las fuentes contaminantes existentes en las cercanías, para lo que se ha recurrido al Inventario de Emisiones a la Atmósfera en Andalucía, publicado por la Consejería de Medio Ambiente de la Junta de Andalucía en 2003. Para introducir las características topográficas, se ha contado con un modelo digital del terreno de una resolución de 100 metros. Por último, el modelo necesita la meteorología de la zona, para lo que se han utilizado los valores registrados en las torres meteorológicas que la Consejería de Medio Ambiente dispone en la zona de estudio.

Genéricamente, los resultados que ofrece un modelo de dispersión son la respuesta en niveles de calidad del aire a las fuentes de emisión introducidas en la ejecución del mismo. Por tanto, además de los errores propios del proceso de modelización, los resultados no tienen en cuenta otras fuentes de emisión no incluidas ni la contaminación de fondo. Este hecho se contrapone a la medida realizada con los captadores, que determinan la totalidad de la concentración de contaminantes en una zona.

Por tanto, es posible obtener para cada punto de la zona de estudio el error del modelo (o, genéricamente, la concentración de fondo), sin más que restar del resultado de los captadores difusivos la salida del modelo de dispersión. Gracias al empleo de Sistemas de Información Geográfica, es posible realizar todo el álgebra de capas necesaria, así como la representación espacial de los resultados conseguidos.

Esta descomposición de los niveles de contaminación permite determinar la contribución relativa de las fuentes industriales a la concentración total del contaminante. Este hecho convierte al método aquí propuesto en una herramienta de gran utilidad para establecer políticas activas de protección, ya que, variando los parámetros de entrada en la modelización, puede determinarse las disminuciones que introduciría una regulación en las empresas que contribuyen más a la concentración final obtenida, o cómo se verían afectados los niveles de contaminación con la implantación de nuevas actividades potencialmente contaminadoras en el entorno del espacio protegido.

Hasta el momento, estos estudios se han realizado en el Parque Natural de Cabo de Gata-Níjar (Almería) y el Parque Natural de Los Alcornocales (Cádiz), al ser grandes extensiones protegidas próximas a importantes polígonos industriales.

Modelización mediante técnicas de minería de datos en Murcia y Madrid.

En la actualidad Iberinco se encuentra desarrollando, en su fase final, el proyecto “Implantación de un sistema de supervisión del medio ambiente atmosférico y realización de estudios de dispersión en el área de influencia del valle de Escombreras (Murcia) ” (Proyecto ARIES). Dicho proyecto ha sido promovido por las empresas AES, Gas Natural e Iberdrola, bajo la supervisión de la Comunidad Autónoma de la Región de Murcia, del Ministerio de Medio Ambiente y del Ayuntamiento de Cartagena.

En dicho proyecto ha sido desarrollado un sistema operacional de diagnóstico y predicción de la calidad del aire en la zona indicada, usando como herramientas base los modelos RAMS y CAMx, con el apoyo de sistemas de modelización complementarios.

Igualmente, en el marco del proyecto han sido efectuados diversos estudios experimentales en los cuales se ha realizado la medición de variables meteorológicas y de contaminantes en diferentes puntos de muestreo. Tales estudios han incluido la realización de campañas de cartografiado de inmisión utilizando captadores pasivos para ozono, NO/NO₂, SO₂ y diferentes tipos de COV, los cuales han servido para complementar una base de datos que se ha utilizado para la validar y ajustar modelos utilizados.

Dicha base de datos ha sido utilizada para desarrollar varios modelos estadísticos basados en **técnicas de minería de datos**, fundamentalmente **redes neuronales e IBK**, para diversas variables meteorológicas y concentraciones de ozono. Estos modelos son utilizados como sistema de respaldo, alternativo al sistema operacional, facilitando en minutos una actualización hora a hora de la información, para un horizonte máximo de hasta 48 horas.

Por otra parte, en la actualidad, **Iberinco** se encuentra desarrollando una batería de herramientas de mejora de la predicción que actualmente se realiza en los servicios de vigilancia de la calidad del aire del **Ayuntamiento de Madrid**. Dichas herramientas proporcionarán la concentración horaria de NO₂, O₃ y partículas en el casco urbano de Madrid, para un horizonte temporal de hasta 24 horas. Para ello, se están elaborando modelos estadísticos específicos, mediante el análisis del registro histórico de la contaminación y haciendo uso de técnicas de minería de datos, utilizando árboles de decisión, redes neuronales e IBK.

5. POSIBLES CONTENIDOS DE UNA FUTURA WEB ESPAÑOLA SOBRE MODELIZACIÓN ATMOSFÉRICA

En CIEMAT, se ha estado planteando la posibilidad de poner en marcha un portal web de modelización de la contaminación atmosférica, donde se pueda reunir toda la información relevante sobre modelos, descripción, aplicaciones, resultados de simulaciones a nivel nacional para la evaluación de la calidad del aire, predicciones, noticias, cursos, enlaces a otras web, congresos, etc.

Se plantea orientar esta Web hacia un “entorno colaborativo” con acceso a miembros del grupo o comunidad de modelistas y usuarios, donde se pudiera volcar software libre, documentos actualizados, experiencias, foro de debate, etc.

Se ha estado trabajando en diseño y estructura de contenidos, así como, en la preparación del material escrito y gráfico.

Esta web podría tener una página principal incluyendo una presentación del portal:

PRESENTACION

La Directiva Europea Marco sobre Evaluación y Gestión de la Calidad del Aire Ambiente (1996/62, Diario Oficial nº L 296 de 21/11/1996), en su preámbulo se refiere al “uso de otras técnicas de estimación de la calidad del aire además de las medidas”. En su artículo 2, define como evaluación “cualquier método usado para medir, calcular, predecir o estimar el nivel de un contaminante...”. Posteriormente, en los artículos 4 y 6, establece claramente la modelización matemática como uno de los métodos posibles de uso en la evaluación de la calidad del aire.

Los modelos de dispersión de contaminantes son un buen complemento a las mediciones. Pueden ser utilizados para realizar predicciones de la calidad del aire, diseñar planes y estrategias de mejora de la calidad del aire y permiten entender de forma integrada los procesos físico-químicos implicados en la contaminación atmosférica.

Esta Web surge con la intención de ser un elemento aglutinador de la información existente sobre la modelización de la contaminación atmosférica, proporcionando el conocimiento necesario y el acceso a herramientas útiles para facilitar la labor de técnicos y especialistas en contaminación atmosférica de la administración y empresas y de estudiantes e investigadores.

Existirán diversas secciones:

1. Introducción a los modelos atmosféricos, donde se expondrán:
 - ∄ fundamentos de la modelización de la contaminación atmosférica,
 - ∄ tipos de modelos,
 - ∄ aplicabilidad de los mismos,
 - ∄ papel de la modelización en la legislación sobre calidad del aire,
 - ∄ criterios a seguir en la selección de un modelo.
2. Tipos de modelos, donde se explicará con más detalle los aspectos básicos de diferentes tipos de modelos:
 - ∄ Modelos meteorológicos.
 - ∄ Modelos de dispersión.
 - ∄ Modelos fotoquímicos.
 - ∄ Modelos de street-canyon.
 - ∄ Modelos a gran escala.

Incluirán descripciones de los modelos más destacados y los enlaces a las web de las instituciones en que fueron desarrollados.

3. Modelos atmosféricos utilizados en España. Incluirá un listado de los modelos utilizados en España tanto por universidades y centros de investigación como por empresas y administración local, autonómica y del Estado. Se describirán los mismos y en qué tipo de problema, estudios y/o aplicación están siendo utilizado.
4. Enlaces de interés, que permitirá al usuario tener un acceso rápido a otras web (se muestran algunos enlaces posibles):

∄ temáticas,

<http://air-climate.eionet.eu.int/databases/MDS/index.html> Model Documentation System EEA

<http://www.epa.gov/ttn/scram/> Modelos de la EPA

<http://www.epa.gov/oar/oagps/modeling.html> Más modelos de la EPA

<http://www.mmm.ucar.edu/mm5/> Modelo meteorológico MM5

<http://redibericamm5.uib.es/> Red Ibérica de MM5

<http://rams.atmos.colostate.edu/> Modelo meteorológico RAMS.
<http://euler.lmd.polytechnique.fr/chimere/> Modelo fotoquímico CHIMERE
<http://www.troposfera.org/> Portal español sobre calidad del aire
<http://www.emep.int/> Programa de Contaminación Transfronteriza EMEP
<http://momac.uclm.es/> Modelo PROMES
<http://www.harmo.org/> Iniciativa de armonización de modelos regulatorios

€ grupos de investigación en modelización atmosférica

http://www.ciemat.es/actividad/programas/p_ta_contaminacion.html Unidad de Contaminación Atmosférica. CIEMAT
<http://www.bsc.es/projects/earthscience.es.htm> Barcelona Supercomputing Center
<http://www.ija.csic.es/gt/geoamb/> Instituto de Ciencias de la Tierra "Jaume Almera" - CSIC
<http://lpas.epfl.ch/MOD/index.en.html> Grupo de Modelización de la Escuela Politécnica Federal de Lausana (Suiza)
<http://www.upc.edu/mediambient/esp/atmosfera.html> Web de medio Ambiente de la Universidad Politécnica de Cataluña
<http://www.meteogalicia.es/> METEOGALICIA
<http://artico.lma.fi.upm.es> Grupo de Modelos y Software para el medio Ambiente de la Facultad de Informática de la Universidad Politécnica de Madrid
<http://www.ceam.es> Fundación Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo (CEAM)

€ de instituciones, proyectos y programas

<http://www.mma.es/> Ministerio de Medio Ambiente
<http://www.inm.es/> Instituto Nacional de Meteorología
<http://www.ciemat.es> CIEMAT
<http://www.eea.eu.int/> Agencia Europea de Medio Ambiente (EEA)
http://europa.eu.int/comm/dgs/environment/index_es.htm Dirección General de medio Ambiente de la Unión Europea
<http://www.ei.jrc.it/> Instituto de Medio Ambiente del Joint Research Center (Ispra-Italia)
<http://www.epa.gov/> Agencia de Protección del Medio Ambiente de Estados Unidos (EPA)
<http://etc-acc.eionet.eu.int/> European Topic Centre on Air and Climate Change

<http://www.juntadeandalucia.es/medioambiente/> Consejería de Medio Ambiente de la Junta de Andalucía

http://www.comadrid.es/comun/medioAmbiente/0.3149.52811278_0_53434437_.00.html Consejería de Medio Ambiente de la Comunidad de Madrid

<http://www.ayto-zaragoza.es/azar/ayto/medioam/default.htm> Concejalía de Medio Ambiente de Zaragoza

<http://www.puertos.es/index.jsp> Puerto del Estado

<http://www.accent-network.org/> Red de Excelencia ACCENT

<http://europa.eu.int/comm/environment/air/cafe/> Programa CAFE

<http://europa.eu.int/comm/environment/air/ambient.htm> Directivas Europeas y Guías sobre Calidad del Aire

<http://www.eduambiental.org/> . Ayuntamiento de Las Palmas de Gran Canaria que disponen del sistema de Predicción con la versión última de OPANA (incluyendo MM5-CMAQ).

<http://www.cost728.org/> Enhancing mesoscale meteorological modelling capabilities for air pollution and dispersion applications

≠ datos de interés para la modelización.

<http://air-climate.eionet.eu.int/databases/airbase/> AIRBASE

<http://edcdaac.usgs.gov/gtopo30/gtopo30.asp>. Datos topográficos y usos de suelo mundiales. USGS. USA.

<http://weather.uwyo.edu/> Datos meteorológicos mundiales. Universidad de Wyoming.

<http://webdab.emep.int/> Datos de emisiones EMEP.

<http://redibericamm5.uib.es/basesdatos.htm> Datos meteorológicos para el modelo meteorológico MM5

5. Predicciones meteorológicas y de calidad del aire, donde habrá enlaces directos con páginas Web donde se muestre información de este tipo. A continuación, se muestran algunos enlaces posibles:

- ≠ <http://www.prevail.org/fr/>. Predicción de ozono en Europa Occidental. Modelo CHIMERE
 - ≠ <http://db.eurad.uni-koeln.de/prognose/> Predicción de calidad del aire en Europa. Modelo EURAD
 - ≠ <http://forecast.uoa.gr/dustindx.html>. Predicción de polvo en suspensión. Modelo SKIROM
 - ≠ <http://www.bsc.es/projects/earthscience/DREAM/> Mapas de polvo en superficie. Modelo BSCICOD-DREAM
 - ≠ <http://www.infomet.fcr.es/> Predicción meteorológica. Portal de meteorología de la Universidad de Barcelona.
 - ≠ <http://www.meteosim.com/mass/> Predicción meteorológica modelo MASS.
 - ≠ <http://www.inm.es/web/infmet/modnum/hirlam.html> Predicciones meteorológicas del modelo HIRLAM. INM.
 - ≠ <http://www.wetterzentrale.de/topkarten/> Predicción meteorológica de diversos modelos.
 - ≠ <http://atmosfera.lma.fi.upm.es/mm5v3.6>. Predicción meteorológica con MM5 para toda la Península Ibérica.
 - ≠ http://verde.lma.fi.upm.es/cmaq_eu/. Sistema MM5-CMAQ en predicción para toda Europa (incluyendo los países del Este y norte de Africa).
 - ≠ <http://www.ceam.es/ceamet>. Meteorología y previsiones meteorológicas en la Comunidad Valenciana
6. Resultados de aplicación de modelos en la evaluación de la calidad del aire en España
- Existirá un apartado para mostrar y descargar los resultados de los modelos utilizados en la evaluación anual de la calidad del aire en España. Actualmente, podrían ponerse los resultados para el año 2002 (SO₂ y Pb), 2003 (SO₂, CO, Pb y PM₁₀ primario antropogénico) y próximamente los correspondientes a 2004. Esta información puede ser útil para establecer condiciones de contorno e iniciales de modelos de dispersión y meteorológicos aplicados a zonas concretas de la Península Ibérica y Baleares.
7. Apartado de información y documentación relativa a noticias, cursos, publicaciones y congresos sobre el tema, En cuanto a cursos, se está considerando la posibilidad de realizar cursos Web utilizando la tecnología E-learning.. En lo referente a congresos y publicaciones, se puede informar de las novedades editoriales y los congresos y conferencias tanto nacionales como internacionales que se celebren.

6. REFERENCIAS

Arévalo G. (2005). Inventario de emisiones atmosféricas en la Comunidad Valenciana para uso en modelización fotoquímica y de material particulado. Tesis Doctoral. Director: José M^a Baldasano

Arévalo G., R. Salvador, S. Gassó, M. Millan and J.M. Baldasano (2004) Application of a high-resolution emission model in Valencia Community (Spain). C. Brebbia (Editor). Air Pollution XII. WIT Press: 31-40.

Berkowicz, R. (2000) OSPM - A parameterised street pollution model, Environmental Monitoring and Assessment, Volume 65, Issue 1/2, pp. 323-331.

Berkowicz, R., Ketzel, M., Vachon, G., Louka, P., Rosant, J.-M., Mestayer, P.G. and Sini J.-F. (2002) Examination of Traffic Pollution Distribution in a Street Canyon Using the Nantes'99 Experimental Data and Comparison with Model Results, Water, Air and Soil Pollution: Focus 2(5), 311-324.

Bornstein, R. D., S. Klotz, U. Pechinger, R. Salvador, R. Street, L.J. Shieh, F. Ludwig and R. Miller, (1987) Application of linked three dimensional PBL and dispersion models to New York City. Air Pollution Modeling and its Application V. Plenum Press, New York, 543-564.

Byun, D.W., J. Young, G. Gipson, J. Godowitch, F. Binkowsky, S. Roselle, B. Benjey, J. Pleim, J.K.S. Ching, J. Novak, C. Coats, T. Odman, A. Hanna, K. Alapaty, R. Mathur, J. McHenry, U. Shankar, S. Fine, A. Xiu and C. Lang, 1998. Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model. Proceedings of the American Meteorological Society 78th Annual Meeting Phoenix, AZ, Jan 11-16, 1998. pp. 264-268.

Clappier et al (2000) Effect of the sea breeze on air pollution in Greater Athens Area. Journal of Applied Meteorology, 39.

Dudhia J. et al. (2001). PSU/NCAR Mesoscale Modelling System. Tutorial Class Notes and User's Guide. Mesoscale and Microscale Meteorology Division. National Center for Atmospheric Research. USA. Ver también: <http://www.mmm.ucar.edu/mm5/>

Erbrink J.J. (1995) Turbulent diffusion from tall stacks. The use of advanced boundary layer meteorological parameters in the gaussian dispersion model "STACKS". Ph.D. Thesis, Free University, Amsterdam.

Ermak, D.L. (1990). User's Manual for SLAB: An atmospheric Dispersion Model for Denser-than-air Releases. Atmospheric and Geophysical Division, University of California, Lawrence Livermore National Laboratory, California, Junio.

Gaertner, M.A., Fernández, C. y Castro, M.. (1993). A two dimensional simulation of the Iberian summer thermal low. Monthly Weather Review, 1993, 121, 2740-2756.

Gangoiti, G., Millán, M. M., Salvador, R., and Mantilla, E. (2001). Diurnal Cycles in the Western Mediterranean and Associate Long-range Transport of Pollutants during the European RECAPMA Project. Seventh International Conference On "Hamonization Within Atmospheric Dispersion Modelling For Regulatory Purposes, Belgirate. Italia

Grell, G. A., et al. (2005), Fully coupled "online" chemistry within the WRF model, Atmos.Environ., 39, 6957-6975.

Jiménez, P., Jorba, O. R. Parra, J.M. Baldasano (2005) Influence of horizontal model grid resolution on tropospheric ozone levels. International Journal of Environment and Pollution, 24, 1/2/3/: 180-200.

Jiménez P., O. Jorba, R. Parra and J.M. Baldasano (2006) Evaluation of MM5-EMICAT2000-CMAQ performance and sensitivity in very complex terrains: high-resolution application to the northeastern Iberian Peninsula. Atmospheric Environment (in press)

Lozano, A. 2005. Empleo de técnicas SIG para la evaluación de la calidad del aire en zonas rurales. IG+, más que información geográfica. Vol. 4 otoño-invierno 2005. Gerona. ISSN 1885-0715.

Lyons, W.A., C.J. Tremback, and R.A. Pielke, (1995) Applications of the Regional Atmospheric Modeling System (RAMS) to provide input to photochemical grid models for the Lake Michigan Ozone Study (LMOS). J. Appl. Meteor., 34, 1762-1786.

Martín, F., S. N. Crespí and M. Palacios, (2001a): Simulations of Mesoscale Circulations in the Center of the Iberian Peninsula for Thermal Low Conditions. Part I: Evaluation of the TVM model. J. Appl. Meteor 40, 880-904.

Martín, F., S. N. Crespí and M. Palacios, (2001b): Simulations of Mesoscale Circulations in the Center of the Iberian Peninsula for Thermal Low Conditions. Part II: Analysis of the transport pattern variability. J. Appl. Meteor. 40, 905-914.

Martín F., C. González, A. Bailador, E. Sánchez, I. Palomino, M. Palacios, S.N. Crespí and C. Gorostiza (2002a). SICAH: An automatic system for control and prevention of air pollution in Huelva (Spain). International Journal of Environment and Pollution, 16, 1-6

Martín F, I. Palomino y M. García (2003). Aplicación de un modelo de dispersión para la evaluación de la calidad del aire en España. Año 2002. Informe para la Dirección General de Calidad y Evaluación Ambiental. Ministerio de Medio Ambiente. 17 diciembre 2003. Ref: 03/2003.

Martín F., Palomino I. y García M. (2004). Actividades 1º semestre 2004. Evaluación de la Calidad del Aire en España mediante Modelos Informe CIEMAT para DGCEA-Ministerio de Medio Ambiente. Ref. 04/2004.

Martín F, I. Palomino y M. García (2004b). Aplicación de un modelo de dispersión para la evaluación de la calidad del aire en España. Año 2003 y actividades del 2º Semestre de 2004. Informe para la Dirección General de Calidad y Evaluación Ambiental. Ministerio de Medio Ambiente. 19 Noviembre 2004. Ref: 05/2004

Martín et al, (2005) Aplicación de un modelo de dispersión para la evaluación de la calidad del aire en España. Año 2004 y actividades del 2º Semestre de 2005. Informe para la Dirección General de Calidad y Evaluación Ambiental. Ministerio de Medio Ambiente. 11 Noviembre 2005. Ref: 07/2004

Martín et al (2005). A modelling system to forecast atmospheric pm concentrations in Spanish ports. 1st International Conference on HARBOURS AND AIR QUALITY. 15-17 June 2005 Palazzo San Giorgio Genova (Italy)

Mc Rae et al (1982). Mathematical modeling of photochemical air pollution. Final report to SCARB in Completion Research. ARB Contract No. A%-187-30. California Institute of Technology, Pasadena, USA.

Menut L., R.Vautard, M.Beekmann and C.Honoré, (2000). Sensitivity of Photochemical Pollution using the Adjoint of a Simplified Chemistry-Transport Model, Journal of Geophysical Research - Atmospheres 105, D12, 15,379-15,402.

Moussiopoulos N., Sahm P., Kunz R., Vögele T., Schneider Ch. and Kessler Ch. (1997), High resolution simulations of the wind flow and the ozone formation during the Heilbronn ozone Experiment, Atmos. Environ. 31, 3177-3186.

Nickovic, S., A. Papadopoulos, O. Kakaliagou and G. Kallos, 2001. Model for prediction of desert dust cycle in the atmosphere. Journal of Geophysical Research 106, 18113 – 18129

Palacios M. (2001) Incidencia del Tráfico Rodado en la Generación de Contaminantes Atmosféricos. Aplicación de un Modelo de Dispersión al Area de Influencia de la Comunidad de Madrid. Tesis doctoral. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales. Universidad Politécnica de Madrid.

Palacios M., H. Cabal y F. Martín (2001). Methodologies for Estimating Disaggregated Anthropogenic Emissions - Application to a Coastal Mediterranean Region of Spain. Journal of Air and Waste Management Association , 51, 642-657

Palacios M. (2001) Influencia del tráfico rodado en la generación de la contaminación atmosférica. Aplicación de un modelo de dispersión al área de influencia de la Comunidad de Madrid. Tesis doctoral. 2 volúmenes, pp. 310. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales. Universidad Politécnica de Madrid. Colección de Documentos CIEMAT.

Palacios M. y F. Martín (2002). Metodología a macroescala aplicada a la elaboración de inventarios de emisiones de contaminantes a la atmósfera para la comunidad autónoma de Madrid y su área de influencia. Centro de Información Tecnológica, CIT , Vol. 13, Nº 3, Chile

Palacios M., A. Martilli, F. Kirchner, A. Clappier, F. Martín y M. E. Rodríguez (2002a). Photochemical modeling of summer ozone episodes in the Greater Madrid Area. International Journal of Environment and Pollution, 18, 1

Palacios M., Frank Kirchner, A. Martilli, A. Clappier, F. Martín y M. E. Rodríguez (2002b). Summer Ozone Episodes in the Greater Madrid Area: Analysis of the Ozone Response to Abatement Strategies by Modeling. Atmospheric Environment , 36, 5323-5333

Palau, J. L.; Pérez-Landa, G.; Diéguez, J. J.; Monter, C. and Millán, M. M. (2005) The importance of meteorological scales to forecast air pollution scenarios on coastal complex terrain. Atmospheric Chemistry and Physics., 5, 2771-2785.

Palau, J. L.; Pérez-Landa, G.; Meliá, J.; Segarra, D.; Millán, M. M. (2006) A study of dispersion in complex terrain under winter conditions using high-resolution mesoscale and Lagrangian particle models. Atmospheric Chemistry and Physics, 6, 1105-11034.

Palau, J.L.; Meliá, J.; Segarra, D.; Pérez-Landa, G.; Santa-Cruz, F.; Millán, M.M. (2006) Seasonal differences in power plant plume fumigations on complex terrain, Environmental Monitoring and Assessment, SUBMITTED.

Palau, J.L.; Millán, M.M.; Pérez-Landa, G. (2005a) Contribution to Background Air Quality at Regional and Global Scales. In: Report of ACCENT-T&TP Barnsdale expert meeting: Frontiers in Transport and Transformation of Pollutants, editores: P. Monks y P. Borrell. Ed. Keele University; Staffordshire, UK; pp. 57-60.

Parra R., P. Jiménez, J.M. Baldasano (2006) Development of the high spatial resolution EMICAT2000 emission model for air pollutants from the north-eastern Iberian Peninsula of Catalonia, Spain. Environmental Pollution 140/2, 200-219, doi:10.1016/j.envpol.2005.07.021

Parra R. (2004) Desarrollo de un inventario de emisiones atmosféricas para su uso en modelos de dispersión fotoquímica - Aplicación para el área geográfica de Cataluña. Tesis Doctoral. Director: José M^a Baldasano

Pérez C., S. Nickovic, M. Sicard, F. Rocadenbosch, V. E. Cachorro, G. Sappe and J.M. Baldasano (2006) Saharan Dust over the Western Mediterranean: Lidar, Sun Photometer Observations and Regional Dust Modelling. *Journal of Geophysical Research* (in press)

Pérez C., S. Nickovic, G. Pejanovic, J.M. Baldasano and E. Ozsoy (2006) Interactive Dust-radiation Modeling: A Step to improve Weather Forecast. *Journal of Geophysical Research* (in press)

Pérez-Landa, G.; Ciais, P.; Sanz, M.J.; Gioli, B.; Miglietta, F.; Palau, J.L.; Gangoiti, G.; Millán, M.M. (2006) Mesoscale transport of atmospheric CO₂ over complex terrain in the Valencia coastal region, Spain. Part 1. Simulation of diurnal circulation regimes. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 6, 2809-2852.

Pielke, R. A., Cotton, W. R., Walco, R. L., Tremback, C. J., Lyons, W. A., Grasso, L. D., Nicholls, M. E., Moran, M. D., Wesley, D. A., Lee, T. J., and Copeland, J. H., A comprehensive meteorological modelling system RAMS, *Meteor. Atmos. Phys.*, 49, 69-91, 1992.

Pielke, R.A, Sr., (2002): Mesoscale meteorological modeling. 2nd Edition, Academic Press, San Diego, CA, 676 pp.

San José R., J.F. Prieto, J. Martín, L. Delgado, E. Jiménez (1997) Integrated Environmental Monitoring, Forecasting and Warning Systems in Metropolitan Areas (EMMA): Madrid Application. Computational Mechanics Publications. ISBN: 1-85312-461-3 pp. 313-323.

San José R., J.I. Peña; J.L. Pérez and R.M. González (2003) EMIMO: An emission model; ISBN 3-540-00840-3 Springer Verlag, pp. 292-298

San José R., J.L. Pérez and R.M. González (2006a) Air Quality real-time operational forecasting system for Europe: An application of the MM5-CMAQ-EMIMO modeling system. *WIT Transactions*

on Ecology and the Environment, vol. 86. ISSN 1743-3541 (on-line) ; ISSN 1746-448X (print); ISBN 1-84564-165-5. pp. 75-84.

San José R., J.L. Pérez and R.M. González (2006b) Air Quality street level simulations by using an integrated mesoscale air quality modeling system (MM5-CMAQ-EMIMO) and a CFD model (MIMO): Madrid case study. WIT Transactions on Ecology and the Environment, vol. 86. ISSN 1743-3541 (on-line) ; ISSN 1746-448X (print); ISBN 1-84564-165-5. pp. 46-53.

San José R., J.L. Pérez and R.M. González (2006c) Real-time and operational air quality forecasts in a power plant in Spain. WIT Transactions on Ecology and the Environment, vol. 86. ISSN 1743-3541 (on-line) ; ISSN 1746-448X (print); ISBN 1-84564-165-5. pp. 213-220.

San José et al (2006d) A Comparison between CHIMERE, CMAQ and CAMx Air quality modelling systems to predict ozone maxima during the 2003 episode in Europe: Sapin Case Study. Comunicación presentada en el ITM 2006. Leipzig. Mayo 15-19, 2006

Santiago J.L. y Martín F. (2005). SLP-2D: A new Lagrangian particle model to simulate pollutant dispersion in street canyons. Proceedings of the 5th Urban Air Quality Conference. Valencia 29-31 March. (in press).

Santiago, J.L. (2006) Estudio numérico y experimental de los flujos atmosféricos y dispersión de contaminantes en entornos urbanos. Tesis doctoral. CIEMAT-ETSI Aeronáuticos-UPM. Directores: Fernando Martín y Angel Sanz.

Schatzmann M., S. Rafailidias, R. Britter, M. Arend (1997) Database, monitoring and modeling of urban pollution. Inventory of models and data sets. Publicado por European Commission, Directorate G XII. Bruselas. ISBN 92-827-9736-8

Schayes, G., P. Thunis and R.D. Bornstein, (1996). Topographic Vorticity_Mode Mesoscale- η (TVM) Model. Part I: Formulation. J. Appl. Meteor., 35, 1815-1823.

Scire, J. S., F. R. Robe, M. E. Fernau, and R. Yamartino, 1999: A user's guide for the CALMET meteorological model (version 5.0). Earth Tech. Inc. MA.

Skamarock, W. C., J. B. Klemp, and J. Dudhia, (2001). Prototypes for the WRF (Weather Research and Forecasting) model. Preprints, Ninth Conference on Mesoscale Processes, Amer. Met. Soc., Ft. Lauderdale, FL, J11-J15.

Stohl, A. ; Hittenberger, M. y Wotawa, G. (1998) "Validation of the Lagrangian particle dispersion model FLEXPART against large scale tracer experiment data". Atmospheric Environment, 24, 4245-4264.

Stohl, A. (1999) "The FLEXPART Particle dispersion model. Version 3.1". <http://www.forst.uni-muenchen.de/EXT/LST/METEO/stohl/>

Thunis Ph. (1995). Formulation and Evaluation of a Nonhydrostatic Vorticity-mode Mesoscale Model. Tesis doctoral. Universidad Catolica de Louvain. Bélgica.

Thunis P. and A. Clappier (2000) Formulation and evaluation of a nonhydrostatic vorticity model (TVM). Monthly Weather Review, 128, 3236-3251.

Thyker-Nielsen, S., Deme, S. and Mikkelsen T. (1998). RIMPUFF, Atmospheric Dispersion Model, RIMDOS8, Users Guide. Department of Wind Energy and Atmospheric Physics, Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark, June 1998.

Trembak, C.J.; Lyons, W.A., Thorson, W.P.; Walko, R.L. (1993). An emergency response and local weather forecasting software system. In: (18 Eds.), Proceedings of the 20th ITM on Air Pollution and its Application. Plenum Press, New York, pp. 423-429.

Xue, M., K. K. Droegemeier, V. Wong, A. Shapiro, K. Brewster, F. Carr, D. Weber, Y. Liu, and D.-H. Wang, 2001: The Advanced Regional Prediction System (ARPS) - A multiscale nonhydrostatic atmospheric simulation and prediction tool. Part II: Model physics and applications. Meteor. Atmos. Physics, 76, 143-165

Undén P. et al. (2002). HIRLAM-5 Scientific Documentation. SMHI Norrköping, Sweden.

Vautard, R., M. Beekmann, and L. Menut, (2000a), Applications of adjoint modelling in atmospheric chemistry: sensitivity and inverse modelling, *Environmental Modelling and Software* 15, 703-709.

Vautard, R., M. Beekmann, J. Roux and D. Gombert, (2000b). Validation of a hybrid forecasting system for the ozone concentrations over the Paris area. *Atmos. Environ.*, 35, 2449-2461.

Vivanco, M.G., Palacios M., Voutard R. y Martín F. (2005). MODELING OZONE IN SPAIN POR AN EPISODE IN SUMMER 2003. Presentación en el 1º Symposium de la Red Europea de Excelencia ACCENT, Septiembre, Urbino (Italia).

Vivanco, M.G. (2005). Simulación de la Contaminación por Ozono en Sao Paulo (Brasil) mediante un modelo fotoquímico y análisis de su potencial aplicación en estrategias de control de emisiones. Tesis doctoral. Colección de Documentos CIEMAT. Madrid.

Wotawa, G. y Stohl, A. (2000) "A tracer dispersion model driven by global-scale analyses and mesoscale (MM5) model output and its validation with tracer experiment data". Proceedings of the 11th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology together with the A&WMA. American Meteorological Society, Boston, USA.

Zack, J. W. and Kaplan, M. L. (1987): Numerical simulations of the subsynoptic features associated with the AVE-SESAME I Case, Part I: The preconvective environment, *M. Weath. Rev.*, 115, 2367–239, 1987.

7. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

Baldasano, J.M. (2000). Modelos de dispersión de contaminantes. Documento elaborado para el Grupo de trabajo sobre Estimación de la Calidad del Aire en España constituido para la aplicación de la Directiva Marco de Calidad del Aire y directivas hijas. Guía metodológica. Ministerio de Medio Ambiente.

CIEMAT (2005). Modelización de la Contaminación Atmosférica. Lecciones del Curso organizado por CIEMAT. Unidad de Formación en Energía y Medio Ambiente. Avda. Complutense 22, 28040 Madrid.

Jacobson M.Z. (1999). Fundamentals of Atmospheric Modeling. Cambridge University Press, Cambridge, UK.

Millán, M. M. (2002) Ozone dynamics in the Mediterranean basin. A collection of scientific papers resulting from the MECAPIP, RECAPMA and SECAP Projects. Air Pollution Research Report 78. Brussels. Páginas 287.

Palau, J. L. (2003) Dispersión atmosférica de las emisiones de una chimenea alta en terreno complejo. ISBN: 84-688-4440-3. Ed. Fundación CEAM. Paterna (Valencia). Páginas 366.

Pielke, R. A. , 2002, Mesoscale Meteorological Modelling. Academic Press. ISBN: :0-12-554766-8. paginas 676.

Pielke R.A. y Pearce R.P. (1994) Mesoscale Modeling of the Atmosphere. Meteorological Monographs. Volume 25. Number 47. American Meteorological Society.

Schenelle, K.B. Jr. y Dey P. R. (2000). Atmospheric Dispersion Modeling Compliance Guide. MC Graw Hill. Professional Engineering, New York.

Seinfeld J. H., (1986). Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. John Wiley & Sons. New York.

Stull R.B. (1988). An introduction to Boundary Layer Meteorology. Atmospheric Sciences Library. Kluwer Academic Publishers. Dordrecht.

Zannetti P. (1990). Air pollution Modeling. Theories, Computational Methods and Available Software. Computational Mechanics Publications. Southampton, Boston. 444 pp.

8. PÁGINAS WEB:

<http://www.mma.es/> Ministerio de Medio Ambiente

<http://www.inm.es/> Instituto Nacional de Meteorología

<http://www.ciemat.es> CIEMAT

<http://www.eea.eu.int/> Agencia Europea de Medio Ambiente (EEA)

<http://www.accent-network.org/> Red de Excelencia ACCENT

<http://etc-acc.eionet.eu.int/> European Topic Centre on Air and Climate Change

http://air-climate.eionet.eu.int/databases/MDS/index_html Model Documentation System EEA

<http://air-climate.eionet.eu.int/databases/airbase/> AIRBASE

<http://europa.eu.int/comm/environment/air/cafe/> Programa CAFE

http://europa.eu.int/comm/dgs/environment/index_es.htm Dirección General de medio Ambiente de la Unión Europea

<http://europa.eu.int/comm/environment/air/ambient.htm> Directivas Europeas y Guías sobre Calidad del Aire

<http://www.emep.int/> Programa de Contaminación Transfronteriza EMEP

<http://www.ei.jrc.it/> Instituto de Medio Ambiente del Joint Research Center (Ispra-Italia)

<http://www.epa.gov/> Agencia de Protección del Medio Ambiente de Estados Unidos (EPA)

<http://www.epa.gov/ttn/scram/> Modelos de la EPA

http://www.mambiente.munimadrid.es/indice_calidad.html / Predicción Calidad del Aire Municipio de Madrid desde 2001 con OPANA V2.

<http://www.epa.gov/oar/oaqps/modeling.html> Más modelos de la EPA

<http://www.mmm.ucar.edu/mm5/> Modelo meteorológico MM5

<http://redibericamm5.uib.es/> Red Ibérica de MM5

<http://rams.atmos.colostate.edu/> Modelo meteorológico RAMS

<http://www.troposfera.org/> Portal español sobre calidad del aire

<http://www.juntadeandalucia.es/medioambiente/> Consejería de Medio Ambiente de la Junta de Andalucía

http://www.comadrid.es/comun/medioAmbiente/0.3149.52811278_0_53434437_.00.html

Consejería de Medio Ambiente de la Comunidad de Madrid

<http://www.ayto-zaragoza.es/azar/ayto/medioam/default.htm> Concejalía de Medio Ambiente de Zaragoza

<http://www.eduambiental.org/> Servicio de Medio Ambiente del Ayuntamiento de Las Palmas de Gran Canaria.

<http://www.puertos.es/index.jsp> Puerto del Estado

<http://www.ija.csic.es/gt/geoamb/> Instituto de Ciencias de la Tierra “Jaume Almera” - CSIC

<http://lpas.epfl.ch/MOD/index.en.html> Grupo de Modelización de la Escuela Politécnica Federal de Lausana (Suiza)

<http://www.upc.edu/mediambient/esp/atmosfera.html> Web de medio Ambiente de la Universidad Politécnica de Cataluña

<http://www.meteogalicia.es/> METEOGALICIA

<http://artico.lma.fi.upm.es> Grupo de Modelos y Software para el medio Ambiente de la Facultad de Informática de la Universidad Politécnica de Madrid.

<http://www.ceam.es> Fundación Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo (CEAM)

<http://momac.uclm.es/> Modelo PROMES

<http://www.harmo.org/> Iniciativa de armonización de modelos regulatorios

ANEXO I

Listado de modelos por orden alfabético incluidos en el COST 728 y 732

Nombre abreviado	Nombre Completo	Versión	
		Fecha	Revisión
ADMS-Urban	Atmospheric Dispersion Modelling System (ADMS)-Urban		Version 2.0
AERMOD	AMS/EPA Regulatory Model	04-18-05	Version 04300
CALGRID	California Grid Model		
CAR-FMI	Contaminants in the Air from a Road-Finnish Meteorological Institute		
Chensi	List, classification and detail view of model entries	20th Sept 2005	
CMAQ	Community Multiscale Air Quality Model		
ENVIRO-HIRLAM	On-line integrated atmospheric pollution and weather prediction model ENVIRO-HIRLAM	12.09.2005	
EPISODE	AirQUIS-EPISODE	2005-10-10	3.2
FLEXPART	FLEXPART Particle Dispersion Model 5.0	08-09-2002	
FVM	List, classification and detail view of model entries		
GME	Globalmodell (of DWD)	24 Aug 2005, Ver.2.6	
GRAMM	Graz Mesoscale Model		
Hirlam	High Resolution Limited Area Model	05-07-2005	Version 6.3.5a + some local changes
LME	Lokalmodell Europa	28 Sep 2005, version LME 3.16	
LME_MH	Lokalmodell mixing heights	28 Sep 2005	
LOTOS-EUROS	LOTOS-EUROS	5 october 2005	
LPDM	Lagrangian Particle Dispersion Model	28 Sep 2005	
MARS (UoT-GR)	Model for the Atmospheric Dispersion of Reactive Species	February 1995	Version 2.0
MARS (UoA-PT)	Model for the Atmospheric dispersion of reactive species	1995	Version 2.0
MATCH	Multi-scale Atmospheric Transport and Chemistry	2006-01-09	version 4.4
MECTM	Mesoskaliges Chemie, Transportmodell		
MEMO (UoT-GR)	Mesoscale Model	September 1997	Version 6.0
MEMO (UoA-PT)	Mesoscale meteorological model	April 1994	Version 5.0
MERCURE	Mercure_Saturne	11/2005	1.1
METRAS	Mesoskaliges Chemie, Transport- und Strömungsmodell	11-02-2005	6.x

Nombre abreviado	Nombre Completo	Versión	
		Fecha	Revisión
MICTM	Mikroskaliges Chemie, Transportmodell		
MIMO	Microscale Model	July 2003	Version 91
MITRAS	Mikroskaliges Chemie, Transport- und Strömungsmodell	06-27-2005	2.x
MM5 (UoA-GR)	Fifth Generation PSU/NCAR Mesoscale Model	May 2005	MM5 3.6.1
MM5 (UoA-PT)	Fifth-Generation NCAR / Penn State Mesoscale Model (MM5)	May 12, 2005	MM5 3.7.2
MM5 (UoH-UK)	Fifth Generation PSU/NCAR Mesoscale Model		
MUSE	Multilayer Dispersion Model	November 1996	Version 1.1
NHHIRLAM	Nonhydrostatic extension to HIRLAM		applies to HIRLAM 6.4.0
OFIS	Ozone Fine Structure Model	July 2003	Version 2
RAMS	REGIONAL ATMOSPHERIC MODELING SYSTEM	October 2003	Version 4.4.0
SAIMM	SYSTEMS APPLICATIONS INTERNATIONAL MESOSCALE MODEL	OCTOBER	1995
SILAM	Finnish Emergency Dispersion Modelling System	15.10.2005	version 3.6.5
TAMOS	Austrian Emergency Response Model for Nuclear Accidents	14-11-2005	
TCAM	Transport Chemical Aerosol Model	April 2005	V04-2005
TREX	TRansport-EXchange Model	2004	
UM	Met Office Unified Model		6.1
VADIS	Pollutant dispersion in the atmosphere		

CLASIFICACIÓN DE LOS MODELOS

	METEOROLOGY	CHEMISTRY & TRANSPORT
microscale - COST 732	Chensi MERCURE MIMO MITRAS VADIS	ADMS-Urban AERMOD CAR-FMI Chensi MERCURE MICTM MIMO VADIS
mesoscale - COST 728	ENVIRO-HIRLAM FVM GME GRAMM Hirlam LME LME_MH MEMO (UoT-GR) MEMO (UoA-PT) MERCURE METRAS MM5 (UoA-GR) MM5 (UoA-PT) MM5 (UoH-UK) NHHIRLAM RAMS SAIMM TAMOS UM	ADMS-Urban AERMOD CALGRID CMAQ ENVIRO-HIRLAM EPISODE FLEXPART FVM GRAMM LOTOS-EUROS LPDM MARS (UoT-GR) MARS (UoA-PT) MATCH MECTM MEMO (UoT-GR) MERCURE MUSE OFIS SILAM TAMOS TCAM TREX
macroscale	ENVIRO-HIRLAM GME Hirlam TAMOS UM	ENVIRO-HIRLAM FLEXPART LPDM MATCH SILAM TAMOS

ANEXO II

APLICACIONES DE MODELOS EN ESPAÑA

Lista de grupos:

GMSMA-UPM = Grupo de Modelos y Software para el Medio Ambiente de la Facultad de Informática de la Universidad Politécnica de Madrid.

ETSII-UPM = Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.

CNS-BSC = Centro Nacional de Supercomputación.

CIEMAT = Centro de Investigaciones Energéticas Medio Ambientales y Tecnológicas.

IBERINCO = Iberdrola, Ingeniería y Construcción.

CEAM = Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo.

USC = Universidad de Santiago de Compostela.

UB = Universidad de Barcelona.

INM = Instituto Nacional de Meteorología.

Tablas con aplicaciones de los distintos modelos por los grupos anteriores:

MODELOS METEOROLOGICOS I

GRUPOS	MM5	WRF	RSM	CALMET	RAMS	MEMO	TVM
GMSA-UPM	Predicción meteorológica en la Península Ibérica (http://atmosfera.lma.fi.upm.es/mm5v3.6/)		Predicción meteorológica diaria (27x27 Km) Península Ibérica (http://artico.lma.fi.upm.es/ , http://atmosfera.lma.fi.upm.es/rsm/)	Estudios diversos.			
ETSII-UPM	Modelización meteorológica a mesoscala en la Península Ibérica y la Comunidad de Madrid. Uso conjunto con SMOKE y CMAQ.						
CNS-BSC	Modelización meteorológica en Cataluña y Comunidad Valenciana. Uso conjunto con CMAQ. Modelización meteorológica en Península Ibérica.	Predicción de la calidad del aire en España (alta resolución). Proyecto CALIOPE				Meteorología y calidad del aire en Olimpiadas de Barcelona	
CIEMAT	Modelización meteorológica en Península Ibérica. Acoplado a modelo fotoquímico CHIMERE. Modelización meteorológica en zona de Castellón.			Generación de campos meteorológicos. Acoplamiento a MELPUFF. Downscaling de modelos de peor resolución. Evaluación Calidad del Aire en España. Sistemas de control y predicción calidad del aire.			Circulaciones atmosféricas y el transporte de masas de aire en centro de la Península Ibérica en baja térmica estival (Martín et al., 2001 a y b).
CEAM	Modelización meteorológica a alta resolución en la Península Ibérica. Acoplado con el modelo Lagrangiano de dispersión FLEXPART para estudiar la dinámica de contaminantes (Palau et al. 2006). Preparado para ser validado con medidas con sensores de teledetección.				Modelización meteorológica a alta resolución en la Península Ibérica y resto de la Cuenca Mediterránea Occidental. Acoplado con el modelo híbrido de dispersión HYPACT para estudiar la dinámica de contaminantes (Pérez-Landa et al. 2006). Preparado para ser validado con medidas con sensores remotos.		

GRUPOS	MM5	WRF	RSM	CALMET	RAMS	MEMO	TVM
IBERINCO	Sistema de respaldo y modelizaciones alternativas a las del modelo RAMS	En pruebas,.Uso limitado a comparación de modelos		Modulo de respuesta rápida para ayuda en sistemas operacionales de vigilancia. Diseño y optimización de redes de ingeniería (cálculo de la altura de chimeneas, modelización de patrones de circulación, etc) Uso en estudios de ingeniería en conjunción con CALPUFF Modelización fotoquímica experimental en celdas EMEP en conjunción con CALGRID	Diferentes usos en combinación con otros modelos o módulos de cálculo Ejemplos Modelización de la contaminación de focos del sector eléctrico en la península Iberica Sistema operacional de predicción de la contaminación atmosférica en el área de Cartagena y Escombreras y Santurtzi (Area de Bilbao) Modelización base para estudios de efectos sobre masas boscosas en el norte de Castilla y Leon Estudios de Impacto Ambiental de instalaciones industriales y de generación eléctrica junto con modelos fotoquímicos.		
USC							
UB							
INM							

MODELOS METEOROLOGICOS II

GRUPOS	ARPS	MASS	HIRLAM	MIMO	OTROS MODELOS
GMSMA-UPM				Aplicaciones en Madrid, , Las Palmas de Gran Canaria, Londres, etc	
ETSII-UPM					
CNS-BSC					
CIEMAT					
CEAM					
IBERINCO	Uso limitado a comparativas de modelos.		Base meteorológica operacional para el Sistema Unificado de Protección Radiológica y Ambiental (sistema SUPRA) desarrollado por Iberinco para el INIM, para la estimación de dosis radiactivas originadas en posibles accidentes o vertidos en Instalaciones Nucleares de Potencia.		MATHEW, LINCOM MASSCOM
USC	Meteorología para modelo MELPUFF-PORTPUFF, partículas Puerto de A Coruña				
UB		Meteorología para modelo MELPUFF-PORTPUFF (CIEMAT), partículas Puerto de Barcelona y Tarragona			
INIM			Meteorología para modelo MELPUFF-PORTPUFF (CIEMAT), partículas en varios puertos españoles. Y otros contaminantes en Zaragoza (PRECOZ)		

MODELOS DE DISPERSION Y TRAYECTORIAS

GRUPOS	MELPUFF	SLP-2D	FLEXPART	HYPACT	BSC-DREAM	Otros
GMSMA-UPM						
ETSII-UPM						
CNS-BSC					Predicción del transporte del polvo sahariano (http://www.bsc.es/projects/eart-hscience/DREAM/)	
CIEMAT	Diversos estudios, p.e. impacto industria cerámica (Proyecto DUSTCERAM) Evaluación de la Calidad del Aire en España Sistema de predicción de contaminación en zonas urbanas e industriales (SICAH y PRECOZ) y portuarias (PORTPUFF) (Martín et al, 2002, 2003, 2004 y 2005)	Estudio de contaminación en calles. Proyecto SEC. (Santiago, 2006)				
CEAM			Dinámica y dispersión de emisiones extensas (p.e., penachos urbanos) y de fuentes puntuales (p.e., centrales térmicas) (Palau, 2003; Palau et al., 2006).	Mediterráneo occidental: transporte a larga distancia y la recirculación de contaminantes (Gangoiti et al. 2001), interacciones entre diferentes escalas (Palau et al. 2005) y caracterización de circulaciones mesoescalares sobre terrenos complejos costeros.		
IBERINCO				Estudio de contaminación peninsular con origen en focos del sector eléctrico Impacto a larga distancia de emisiones de Centrales Térmicas Influencia de focos emisores a larga distancia en las masas boscosas del norte de Cyl Estudios varios de dispersión de focos puntuales en alta resolución en varios emplazamientos con topografía compleja.		Diversos modelos reguladores de la EPA PLUVUE ADAM MESOI RIMPUFF ADPIC SLAB DEGADIS AFTOX, HYSPLIT, etc

MODELOS FOTOQUÍMICOS

GRUPOS	CMAQ	CAMX	CHIMERE	OPANA	TVM-Chem	CIT	Otros
GMSMA-UPM	Predicción fotoquímica España (27x27 Km) (http://atmosfera.lma.fi.upm.es/cmaq/) Predicción fotoquímica Europa (50x50 Km) (http://verde.lma.fi.upm.es/cmaq_eu/) (San José et al., 2006a). Predicción diaria Las Palmas de G.C. Estudios de impacto en la calidad del aire para centrales de ciclo combinado, incineradoras y cementeras.	Impacto en la calidad del aire de CCTT en Huelva y Castellón (predicción de ozono). Comparación con otros modelos (San José et al., 2006d).	Comparación con CMAQ y CAMx (San José et al., 2006)	Sistemas de predicción en Madrid, Bilbao, Canarias, Andalucía, Asturias, Leicester			
ETSII-UPM	Estudios de calidad del aire en la Península Ibérica y la Comunidad de Madrid. Estimaciones en el horizonte 2000-2020.						
CNS-BSC	Estudios de calidad del aire y episodios de contaminación en Cataluña y Comunidad Valenciana. Predicción de la calidad del aire en España (alta resolución). Proyecto CALIOPE.. (Jiménez et al., 2005 y 2006)		Simulaciones a nivel nacional. Validación y puesta a punto para predicción. Proyecto CALIOPE				
CIEMAT			Simulaciones a nivel nacional. Validación y puesta a punto para predicción. Proyecto CALIOPE (Vivanco et al., 2005)		Estudio de la contaminación fotoquímica en el área de Madrid. Estrategias de reducción y control de la contaminación. (Palacios et al., 2002)	Ozono en Sao Paulo (Brasil) y estrategias de reducción de contaminación (Vivanco, 2005).	
CEAM		Simulación de contaminación por ozono troposférico en las costas Mediterráneas y en el Sur de la Península Ibérica (Proyecto Europeo FUMAPEX).					
TIBERINCO	Uso alternativo a CAMx. y como respaldo en sistemas operacionales.	Sistemas operacional de predicción de la contaminación atmosférica en el área de Cartagena/Escombreras y Santurtzi (Area de Bilbao) Estudios de impacto de por contaminación fotoquímica para instalaciones industriales y de producción de energía eléctrica en diversas áreas de la península (Madrid, Navarra, Extremadura, Cataluña, Castilla-La Mancha, etc.)					PBM CALGRID

MODELOS DE EMISIONES

GRUPOS	SMOKE	CAMO	EMICAT2000 EMIVAL2000	EMIMO	MACTRA Y MICTRA	EPS-WBEIS-MOBILE	EMME/2 - ENIF
GMSMA-UPM		Proyecto OSCAR (EU) aplicado a Madrid, Londres y Helsinki. (http://ambiente.lma.fi.upm.es/oscarweb/). (San José et al., 2006b)		Sistema predicción Europa.desarrollado por GMSMA. Aplicaciones tiempo real en ciudades y estudios de impacto.			
ETSII-UPM	Aplicación a España usando metodología CORINAIR						
CNS-BSC			Desarrollado en BSC Parte clave del Proyecto CALIOPE. (Parra et al, 2006 y Arévalo et al., 2004)				
CIEMAT					Emisiones en Madrid y Castellón. (proyecto BEMA). (Palacios et al, 2001)		
CEAM				Fotoquímica en Huelva y Sevilla. Generando emisiones para Extremadura.			
IBERINCO	Uso limitado a comparativas de modelos					Versiones adaptadas por Iberinco para la elaboración de mapas peninsulares de emisiones, con diferentes resoluciones, para estudios de impacto por contaminación fotoquímica en Murcia, Madrid, Castilla-La Mancha, Asturias, Extremadura, Cataluña, Aragón y Navarra.	Distribución de tráfico y cálculo de emisiones en el diferentes emplazamientos.
						Sistema operacional de predicción en el área de Cartagena/Escombreras	

CAPÍTULO 5

LOS INVENTARIOS DE EMISIONES PARA MODELIZACIÓN

Responsables:

Susana Gil, Generalitat de Catalunya

Rafael Borge, ETSII-UPM.

Índice

1. Introducción
2. Preparación de emisiones para modelización
3. Metodologías de elaboración de inventario de emisiones
4. Ejemplo de tratamiento
 - 4.1 Especiación química
 - 4.2 Desagregación temporal
 - 4.3 Desagregación espacial
5. Referencias

1. INTRODUCCIÓN

Los datos de emisión de contaminantes atmosféricos suponen una entrada crucial para la simulación de la calidad del aire, ya que determinan el volumen y reactividad de los contaminantes responsables a posteriori de los niveles de inmisión en una determinada región. Numerosos estudios en todo el mundo han demostrado la importancia de caracterizar correctamente las emisiones empleadas como datos de entrada a diversos modelos fotoquímicos, tanto desde el punto de vista de los resultados del modelo como de las posibles alternativas de reducción de los niveles de contaminación.

Los inventarios de emisiones se confeccionan a partir de un conjunto de procedimientos de medición o estimación de las emisiones gaseosas de las fuentes relevantes dentro del territorio en cuestión. Existen numerosas clasificaciones y métodos que ayudan a sistematizar y desarrollar el proceso, pero típicamente el resultado es una cuantificación de las emisiones en base anual y en referencia al total nacional.

No obstante, esta información no es suficiente para poder realizar estimaciones de la repercusión de las emisiones en términos de calidad del aire. La razón es que este formato es incompatible con los requerimientos de los modelos empleados para la simulación de los distintos procesos que intervienen en el paso de emisión a inmisión, ya que necesitan cierto tratamiento previo de los datos, la generación de información adicional de diversa naturaleza y una mayor resolución en la información de las emisiones, tanto espacial como temporal, según se detalla más adelante. Esta serie de transformaciones y generación de información auxiliar debe llevarse a cabo conforme a las necesidades de entrada del sistema de modelización de la calidad del aire seleccionado. Al conjunto de procedimientos y herramientas necesarias para integrar y procesar esta información se le suele denominar “**modelo de emisiones**”. Dada la importancia de la información relativa a las emisiones, es imprescindible aplicar la metodología adecuada para las características del inventario de la región de estudio y el sistema de modelización escogido.

2. PREPARACIÓN DE EMISIONES PARA MODELIZACIÓN

La elaboración de un inventario de emisiones exige definir:

1. El área geográfica de estudio.

2. Los sectores que se pretenden tener en consideración (fuentes puntuales, lineales, superficiales, etc.)
3. La resolución espacial y temporal.
4. Los contaminantes a considerar

Los modelos de calidad del aire requieren información sobre la cantidad de contaminantes emitidos en cada punto de un área en estudio en intervalos temporales definidos por lo que los datos de emisión de entrada al modelo deben poseer características especiales como son:

- ≠ Resolución temporal elevada. Normalmente se utiliza una resolución temporal horaria con objeto de estudiar el ciclo diario, aunque algunos modelos operan con intervalos mayores, por ejemplo de un día si se quiere estudiar el ciclo mensual o anual.
- ≠ Resolución espacial alta. Mostrando los datos de emisiones en las celdas de una o varias malla de cálculo a ser posible regulares. Algunos modelos están anidados, esto es, modelos a gran escala suministran las condiciones de contorno para los modelos con los que se analiza un área de estudio determinada.
- ≠ Conocimiento del perfil de especies, que es la cuantificación del total de los contaminantes emitidos por cada fuente y el conocimiento del porcentaje de cada uno de los compuestos específicos a tener en cuenta en los mecanismos químicos usados en los modelos.

Para la elaboración del inventario es necesario clasificar las fuentes en función de las características fundamentales que van a condicionar la forma en que van a ser procesadas. En general se distinguirían fuentes puntuales, de área y móviles, cuyas emisiones se suministran y tratan de forma separada.

En el caso de **fuentes puntuales**, el tratamiento debe realizarse de forma individualizada. Será importante conocer la emisión, la altura del punto de vertido, el momento vertical de los gases de salida, su ubicación y los valores de las variables específicas que determinan la dispersión de contaminantes en el entorno próximo a la fuente, así como la velocidad y temperatura de salida de gases a la atmósfera. Con los parámetros de chimenea y vertido junto con los resultados obtenidos por el modelo meteorológico, se calcula la fracción de las emisiones correspondiente a cada uno de los niveles verticales definidos.

Los modelos eulerianos de última generación incluyen la posibilidad de aplicar algoritmos “plume-in-grid”, de modo que la dispersión de contaminantes en la celda donde se encuentra la boca de la

chimenea se calcula conforme a un modelo de penacho. Una vez alcanzados los límites de la celda en cuestión se pasan los valores obtenidos a las celdas contiguas para expandir los procedimientos de cálculo generales incluidos en la formulación del modelo.

En el caso de **fuentes móviles** el inventario se obtiene a partir de una serie de modelos o procedimientos específicamente desarrollados para ajustarse a las características concretas de este tipo de fuentes. Por ejemplo, dentro de las fuentes móviles de carretera, las tasas de consumo y emisión dependen de la tecnología de los motores, tipo de combustible, velocidad, modo de conducción, etc. Para este tipo de fuentes, la metodología CORINAIR se apoya en el modelo COPERT III (Computer Programme to Calculate Emissions from Road Transport), desarrollado por la Agencia Europea de Medio Ambiente.

Dentro de este grupo existe una importante diferencia entre las fuentes móviles de carretera y el resto (transporte marítimo, aeronáutico, ferroviario y maquinaria industrial, agrícola, etc.). Existen diversos métodos y modelos específicos de cálculo para estas otras fuentes móviles, pero su repercusión en el total de emisiones con respecto a las originadas por el transporte rodado es, en principio, menor. De hecho, algunas fuentes móviles no de carretera (tractores agrícolas por ejemplo) suelen considerarse a menudo como fuentes de área (circunscritas en este caso a la superficie agrícola).

En el caso de de las **fuentes de área o superficiales** se componen en general de diversas unidades emisoras que por su naturaleza, su reducida significación individual o por la forma en que se presenta su información de base (variables de actividad desglosadas por unidades territoriales) han de tratarse de forma agregada sobre una determinada área geográfica.

Típicamente el cálculo de las emisiones de este tipo de fuentes se corresponde con el uso de factores de emisión. Las variables de actividad implicadas en este cálculo se corresponden en general con la superficie ocupada por cierta actividad (cultivos por ejemplo) o la cantidad de combustibles consumidos en determinado ámbito geográfico (gasóleo de calefacción por ejemplo). Posteriormente estos valores se multiplican por una serie de factores de emisión expresados de forma coherente con la definición de cada una de las variables de actividad utilizadas.

Este tipo de fuentes se corresponden, en general, con actividades del sector primario como las agrícola-ganaderas y las extractivas, instalaciones industriales de pequeño tamaño,

establecimientos y unidades comerciales y residenciales o las emisiones producidas en espacios naturales.

3. METODOLOGÍAS DE ELABORACIÓN DE INVENTARIO DE EMISIONES

Dos metodologías son posibles para obtener un inventario de emisiones:

- ≠ El enfoque 'top-down' (escala nacional o regional), que calcula las emisiones totales de una zona o región para lo cual los datos estadísticos necesarios para estimar las emisiones son fiables y están en general disponibles. Las emisiones calculadas son distribuidas entre las celdas según la industria, densidades de tráfico, población, etc. La ventaja de este enfoque es que se obtiene un inventario global y bastante aproximado, pero muy integrado.
- ≠ El enfoque 'bottom-up' necesarios para aplicar en los modelos fotoquímicos que deben tener una resolución espacial y temporal alta. Consiste en calcular para cada celda los parámetros que se necesitan para obtener la contribución de cada celda a las emisiones totales para cada una de las fuentes emisoras y de cada uno de los contaminantes. En este caso, el conocimiento del número de automóviles, la antigüedad, el tipo de vehículo, la velocidad de circulación, el consumo de combustible, el uso de la tierra, la densidad de población, etc. Conocer con tanto nivel de detalle las diferentes fuentes emisoras y exige un número de datos muy elevado con una alta resolución espacial y temporal.

Cuando se pretende integrar un inventario de emisiones no desarrollado específicamente para su uso en estudios de modelización, es necesario procesarlo previamente. La preparación de los datos de emisión para modelización consiste básicamente en la transformación de los valores anuales calculados en los inventarios de emisión o proyecciones en una serie de datos compatibles con los requerimientos del modelo fotoquímico y de transporte. Este tipo de modelos estiman los niveles de inmisión a través de un balance de materia basado en la ecuación de advección-difusión, como queda ilustrado en la expresión genérica simplificada correspondiente a la Ecuación 1.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_j}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^i} (u^i C_j) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^i} \left(K \frac{\partial C_j}{\partial x^i} \right) + R_j(t, C_1, \dots, C_N) + Q_j(t, x^i) \\ + \text{condiciones iniciales} \\ + \text{condiciones de contorno} \end{array} \right. \quad \text{Ecuación 1}$$

donde:

$C_j = C_j(t, x^i)$; concentración de cada una de las especies consideradas

$u^i = u^i(t, x^i)$; componentes del campo de vientos

$K(t, x^i)$; coeficiente de difusión

$R_j(t, C_j)$; tratamiento de la transformación química

$Q_j(t, x^i)$; tratamiento de fuentes y sumideros

Seguidamente se presenta un ejemplo de aplicación para modelización fotoquímica a mesoescala.

4. EJEMPLO DE TRATAMIENTO

4.1 Especiación química

Los modelos eulerianos fotoquímicos son capaces de simular reacciones químicas en diversas fases para un amplio rango de especies. Estos módulos químicos son fundamentales para la modelización de contaminantes secundarios como es el caso del ozono. Los procesos reales asociados a la química fotoquímica son muy complejos por lo cual, los distintos esquemas químicos utilizados habitualmente se basan en considerar un número limitado de las reacciones que se han observado son las más significativas en los mecanismos fotoquímicos. Estos mecanismos incluyen los datos de cinética química observados para cada reacción en función de la temperatura, presión y condiciones de radiación.

Dada la reacción genérica de la Ecuación 2 en las condiciones de presión, temperatura y radiación (P, T, \dots), la evolución de la reacción en el tiempo queda descrita por la ecuación diferencial ordinaria que se muestra en la Ecuación 3.



Ecuación 2

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B]$$

Ecuación 3

Donde [A], [B] y [C] son las concentraciones de las especies químicas A, B y C y k es la constante de equilibrio en esas condiciones. Los distintos mecanismos químicos existentes se basan en datos experimentales de las constantes de equilibrio (k) para las distintas ecuaciones.

Puesto que la cantidad de compuestos involucrados en el proceso real es inasumible para cualquier modelo, especialmente en lo que a compuestos orgánicos volátiles no metánicos (COVNM) se refiere, los distintos mecanismos químicos se basan en técnicas de agrupamiento de determinadas especies que tienen un comportamiento químico afín (*lumping*) para simplificar el modelo teórico. Hay múltiples formas de agrupar compuestos; en función del número de carbonos, del tipo de enlace entre ellos, del grupo funcional, etc. Para afinar aún más existen distintos mecanismos para asignar pesos dentro de los grupos a las distintas sustancias en función de su reactividad relativa.

Sin embargo, los inventarios de emisiones frecuentemente no incluyen información específica sobre las especies involucradas en los esquemas químicos y hay que generar una serie de perfiles de especiación que permitan calcular las emisiones de cada fuente de grupos de compuestos como los COVNM o las partículas en términos de las especies involucradas en el esquema químico seleccionado.

Un ejemplo de mecanismo químico es el *Carbon Bond 4* (CB-4). El esquema químico CB-4 utiliza una representación agregada de los COVNM en función del tipo de cadena de los hidrocarburos, si bien también considera explícitamente algunas de las especies más determinantes en la dinámica fotoquímica, al igual que los compuestos inorgánicos según se puede comprobar en la Tabla 1.

Tabla 1. *Especies primarias del mecanismo CB-4 con extensión para partículas finas ($PM_{2,5}$)*

Especie Inventario	Especie CB-4	Descripción
CO	CO	Monóxido de carbono
NH ₃	NH3	Amoniacó
NO _x	NO	Monóxido de nitrógeno
	NO2	Dióxido de nitrógeno
SO ₂	SO2	Dióxido de azufre
	SULF	Ácido sulfúrico
COV	ALD2	Acetaldehído y aldehídos de mayor peso molecular
	ETH	Etileno o eteno
	FORM	Formaldehído
	ISOP	Isopreno
	NR	Carbono no reactivo
	OLE	Alquenos u olefinas (cadenas con enlaces C=C)
	PAR	Alcanos o parafinas (cadenas con enlaces C-C)
	TERPB	Monoterpenos
	TOL	Tolueno
	XYL	Xileno
PM ₁₀	PMC	Partículas modo grueso ($PM_{10} - PM_{2,5}$)
PM _{2,5}	PEC	Carbono primario elemental
	PNO3	Aerosol primario (nitratos)
	POA	Aerosol primario orgánico
	PSO4	Aerosol primario (sulfatos)
	PMFINE	Partículas modo fino (otros)

A modo de ejemplo, la Figura 1 muestra la composición de los COVNM del Inventario Nacional de Emisiones, según este mecanismo químico.

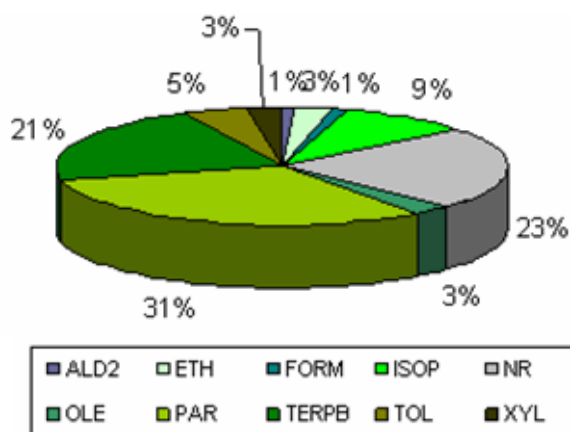


Figura 1. Especiación de los compuestos orgánicos volátiles totales para el año 2000. Adaptada de Borge, R., 2006.

4.2 DESAGREGACIÓN TEMPORAL

Como se ha comentado anteriormente, los inventarios de emisiones tienen típicamente una resolución temporal anual. La mayoría de los modelos de calidad del aire requieren no obstante que las emisiones estén localizadas en periodos horarios a lo largo del año. Es por tanto necesario proceder a la desagregación temporal de las emisiones dentro del dominio temporal del episodio o periodo a modelizar. Para ello se suele recurrir a perfiles temporales que reflejan las oscilaciones en la tasa de emisión de cada una de las fuentes. Normalmente se utilizan perfiles a tres niveles, mensual, diario (pudiendo distinguir los fines de semana del resto de días) y horario, según se ilustra en la Figura 2.

Estos perfiles asignan fracciones o pesos a cada periodo (mes, día, hora), de modo que el producto de todas las fracciones asignadas permitan calcular las emisiones en cualquier periodo horario para una fuente determinada, según la expresión genérica de la Ecuación 4. La suma de todos los pesos o fracciones es igual a la unidad dentro de cada nivel de desagregación temporal.

$$E_{h_i} | E_a \begin{array}{c} \textcircled{R} \\ \textcircled{C} \\ \textcircled{C} \\ \textcircled{C} \\ \textcircled{C} \end{array} \begin{array}{c} Pm_k \\ 12 \\ Pm_i \\ TM_{k|1} \end{array} \begin{array}{c} \textcircled{R} \\ \textcircled{C} \\ \textcircled{C} \\ \textcircled{C} \\ \textcircled{C} \end{array} \begin{array}{c} Pd_j \\ 7 \\ Pd_i \\ TM_{j|1} \end{array} \begin{array}{c} \textcircled{R} \\ \textcircled{C} \\ \textcircled{C} \\ \textcircled{C} \\ \textcircled{C} \end{array} \begin{array}{c} Ph_i \\ 24 \\ Ph_i \\ TM_{i|1} \end{array} \quad \text{Ecuación 4}$$

Donde:

E_{h_i} – Emisión correspondiente a la hora i (dentro del mes k y día j)

E_a – Emisión anual para una actividad y contaminante dados

Pm_k – Peso correspondiente al mes i dentro del año

Pd_j – Peso correspondiente al día i dentro de la semana (asumiendo todas las semanas iguales dentro del mes)

Ph_i – Peso correspondiente a la hora i dentro del día

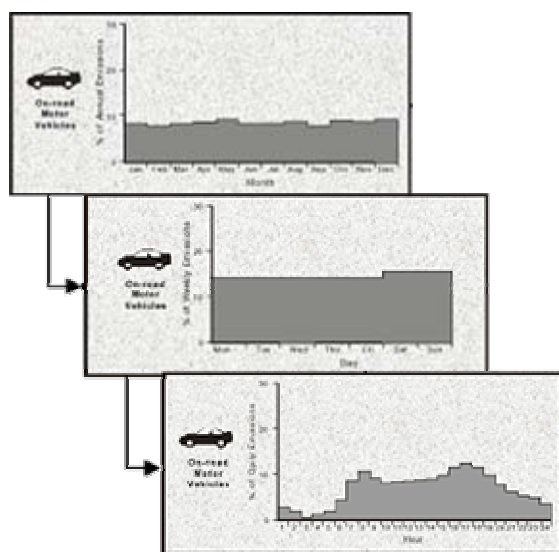


Figura 2. Ejemplo de desagregación temporal para las emisiones del tráfico (mensual, diaria y finalmente horaria). Adaptada de Stella, G. 2001.

4.3 DESAGREGACIÓN ESPACIAL

Típicamente los modelos eulerianos dividen el espacio según una malla tridimensional (regular o no), cuya resolución espacial depende del modelo escogido y del nivel de detalle requerido para cada estudio. La intersección de dicha malla con el terreno genera una malla bidimensional en

superficie con respecto a la cual hay que localizar las emisiones, según se esquematiza en la Figura 3.

En el caso de las fuentes puntuales o de las emisiones calculadas conforme a una metodología bottom-up la referenciación geográfica de las emisiones es inmediata ya que las fuentes están perfectamente localizadas. Sin embargo, es muy común que el dato de partida sea el total emitido en un periodo concreto en el total del dominio geográfico a modelizar. En cualquier caso, sería necesario conocer el lugar exacto donde se producen las emisiones. Esta información no suele estar disponible por lo que habitualmente hay que recurrir al uso de variables sustitutivas o subrogadas (surrogate data). Esta información consiste en la definición de una serie de variables con distribución geográfica conocida y una clara vinculación con las emisiones (por ejemplo las carreteras para el tráfico rodado). Para localizar las emisiones se calcula el ratio de la magnitud de la variable sustitutiva en cada celda entre el valor total de dicha variable en el dominio espacial, según la Ecuación.5. El sumatorio de este ratio para todas las celdas de la malla es igual a 1 en el ámbito geográfico tomado como referencia. El producto del valor total de emisión en el dominio por el ratio calculado para cada celda permite asignar de forma sencilla un valor de emisión a cada celda.

$$E_{CF} = E_a \cdot \frac{S_{CF}}{\sum_{i=1}^{C_{\max}} \sum_{j=1}^{F_{\max}} S_{ij}} \quad \text{Ecuación 5}$$

Donde:

E_{CF} - Emisión correspondiente a la celda de la columna C y fila F

E_a - Emisión anual para una actividad y contaminante dados

S_{CF} - Valor correspondiente a la celda de la columna C y fila F para la variable subrogada S

$\sum_{i=1}^{C_{\max}} \sum_{j=1}^{F_{\max}} S_{ij}$ - Valor total de la variable subrogada S en el dominio (de C_{\max} columnas y F_{\max} filas)

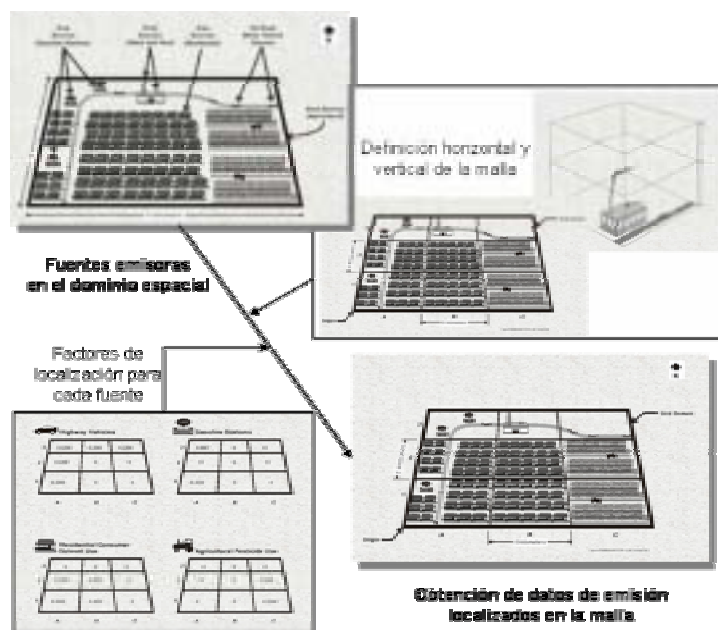


Figura 3. Ejemplo de desagregación espacial. Adaptada de Stella, G. 2001.

5. REFERENCIAS

AED. 2004. Inventarios Nacionales de Emisiones a la Atmósfera 2001 y 2002. 2004. Elaborado por Análisis Estadístico de Datos para la Dirección General de Calidad y Evaluación Ambiental del Ministerio de Medio Ambiente.

Atkinson, R. 2000. Atmospheric chemistry of VOCs and NOX. *Atmospheric Environment*. Vol. 34, pp 2063-2101.

Borge R. 2006. Modelización Atmosférica de Contaminantes Fotoquímicos en la Comunidad de Madrid. Tesis Doctoral. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales. Universidad Politécnica de Madrid. ISBN: 84-689-6700-9.

Byun, D.W. and Ching, J. K. S. 1999. Science algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. Atmospheric Modeling Division. National Exposure Research Laboratory. U.S. Environmental Protection Agency. Research Triangle Park, NC 27711. EPA/600/R-99/030.

Carter, W.P.L. 1994. Development of ozone reactivity scales for volatile organic compounds. Journal of the Air and Waste Management Association. Vol. 44, pp. 881-899.

Carter, W.P.L. and Atkinson, R. 1996. Development and evaluation of a detailed mechanism for the atmospheric reactions of isoprene and NOX. International Journal of Chemical Kinetics. Vol. 28, Pages 497-530.

Carter, W.P.L., 2000. Implementation of the SAPRC-99 chemical mechanism into the Models-3. Framework. Report to the U.S. Environmental Agency, January 29 2000.

Dodge, M. C. 2000. Chemical oxidant mechanisms for air quality modeling: critical review. Atmospheric Environment. Vol. 34, pp. 2103-2130.

Gery, M.W., Whitten, G.Z., Killus, J.P., and Dodge, M.C., 1989. A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling. Journal of Geophysical Research. Vol. 94, pp. 12925-12956.

Griffin, R.J., Dabdub, D. and Seinfeld, J.H. 2002. Secondary organic aerosol 1. Atmospheric chemical mechanism for production of molecular constituents. Journal of Geophysical Research. Vol. 107, pp. 4332-4357.

Intergovernmental Panel on Climate Change. Greenhouse Gas Inventory Reference Manual, Revised 1996 IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories. IPCC-OECD-IEA. 1997

Ntziachristos L. and Samaras, C. 2000. COPERT III. Computer programme to calculate emissions from road transport. User's manual (Version 2.1). European Environmental Agency. Technical report No 50

Russell, A. and Dennis, R. 2000. NARSTO critical review of photochemical models and modeling. Atmospheric Environment. Vol. 34, pp. 2283-2324.

Stella, G. 2001. Inventory Preparation for Emissions Modeling. US. EPA. One Atmosphere, One Inventory, Many Challenges; Conference Emission Inventory Training Session April 30, 2001.

Stockwell W.R., Middleton P. and Chang J. S. 1990. The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. Journal of Geophysical Research. Vol. 95, pp. 16343-16367.

Stockwell, W.R., Kirchner, F., Kuhn, M. and Seefeld, S. 1997. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling. Journal of Geophysical Research. Vol. 102, pp. 25847-25879.

UNECE/EMEP Task Force on Emissions Inventories and Projections. 2004. EMEP/CORINAIR Emission Inventory Guidebook - 3rd edition September 2004 UPDATE. European Environmental Agency. Technical report No 30

CONSIDERACIONES FINALES

A lo largo de este extenso documento, se han abordado diversos aspectos relativos a la modelización de la calidad del aire en España. Se ha hecho una profunda reflexión de las necesidades del gestor de la calidad del aire y qué pueden ofrecer los modelos matemáticos al respecto. Se ha concluido que los modelos de calidad del aire juegan en la actualidad un papel determinante en ciertos aspectos de la gestión de la calidad del aire. Su uso ha sido más intenso en estudios de impacto ambiental y, en menor medida, como herramienta de los sistemas de vigilancia convencionales y sus resultados han sido relegados a un segundo plano como herramienta de ayuda en la toma de decisiones. No obstante, es de esperar que el uso de la modelización en el campo de gestión de la calidad del aire sea creciente en los próximos años.

Por otro lado, se han revisado las necesidades de los modelistas para poder desarrollar mejores modelos, validarlos y aplicarlos. Muchas de estas necesidades son comunes a los usuarios de los modelos. Se ha detectado que es necesaria más investigación sobre los procesos atmosféricos en España y la interacción a diferentes escalas. También se ha detectado la necesidad de información más completa, más fiable, más accesible y transparente y con uniformidad de formatos para el uso, validación y desarrollo de modelos. Se hace necesaria la existencia de buenos inventarios de emisiones nacionales y regionales compatibles entre sí y adecuados para modelización.

Además, se ha discutido sobre las técnicas a seguir para una correcta validación de los modelos proponiendo una metodología y se ha avanzado en la determinación de los requerimientos a exigir a los modelos para abordar problemas de calidad del aire en España teniendo en cuenta factores geográficos, meteorológicos y de características del contaminante y sus fuentes.

En consonancia, con esto último se ha hecho un inventario de los modelos utilizados en el mundo y concretamente en España cubriendo modelos meteorológicos, de dispersión, fotoquímicos, de emisiones, etc, así como un catálogo de las aplicaciones de modelización realizadas por la mayoría de los grupos de modelistas españoles.

Por último, se ha dedicado un apartado especial a los requisitos y procedimientos de adaptación de los inventarios de emisiones para que sean utilizables por los modelos de dispersión.

La labor de este grupo de trabajo creemos que no ha hecho más que empezar, ya que se han tratado temas muy relevantes pero quedan todavía aspectos por discutir que, creemos,

justificarían la continuidad del Grupo de Trabajo de Modelización de la Calidad del Aire con posterioridad a la celebración del V Seminario de Calidad del Aire en España. Este grupo puede ser un foro de contacto entre los modelistas, investigadores y gestores de la calidad del aire. En él, se podrían poner en común los últimos avances o novedades en la materia y establecer prioridades y necesidades concretas de investigación. Se pueden desarrollar guías y metodologías para una mejor selección y uso de modelos, en respuesta a la eterna pregunta de por qué no hay uno o unos modelos oficiales en España. Además, se puede apoyar al Ministerio de Medio Ambiente en ciertos aspectos legislativos en los que la modelización pueda tener un papel relevante, sobre todo a la luz de las últimas directivas europeas y la legislación nacional. Asociado a este grupo, estaría la existencia de un portal Web de modelización de la calidad del aire, que puede ser un elemento de comunicación y de transferencia de información entre modelistas, gestores de calidad del aire y público en general, así como un elemento de formación y consulta para no iniciados.