



Modelització i simulació fotoquímica mesoscalar del transport del material particulat i gasos a l'atmosfera

Raúl Arasa Agudo

ADVERTIMENT. La consulta d'aquesta tesi queda condicionada a l'acceptació de les següents condicions d'ús: La difusió d'aquesta tesi per mitjà del servei TDX (www.tdx.cat) ha estat autoritzada pels titulars dels drets de propietat intel·lectual únicament per a usos privats emmarcats en activitats d'investigació i docència. No s'autoritza la seva reproducció amb finalitats de lucre ni la seva difusió i posada a disposició des d'un lloc aliè al servei TDX. No s'autoritza la presentació del seu contingut en una finestra o marc aliè a TDX (framing). Aquesta reserva de drets afecta tant al resum de presentació de la tesi com als seus continguts. En la utilització o cita de parts de la tesi és obligat indicar el nom de la persona autora.

ADVERTENCIA. La consulta de esta tesis queda condicionada a la aceptación de las siguientes condiciones de uso: La difusión de esta tesis por medio del servicio TDR (www.tdx.cat) ha sido autorizada por los titulares de los derechos de propiedad intelectual únicamente para usos privados enmarcados en actividades de investigación y docencia. No se autoriza su reproducción con finalidades de lucro ni su difusión y puesta a disposición desde un sitio ajeno al servicio TDR. No se autoriza la presentación de su contenido en una ventana o marco ajeno a TDR (framing). Esta reserva de derechos afecta tanto al resumen de presentación de la tesis como a sus contenidos. En la utilización o cita de partes de la tesis es obligado indicar el nombre de la persona autora.

WARNING. On having consulted this thesis you're accepting the following use conditions: Spreading this thesis by the TDX (www.tdx.cat) service has been authorized by the titular of the intellectual property rights only for private uses placed in investigation and teaching activities. Reproduction with lucrative aims is not authorized neither its spreading and availability from a site foreign to the TDX service. Introducing its content in a window or frame foreign to the TDX service is not authorized (framing). This rights affect to the presentation summary of the thesis as well as to its contents. In the using or citation of parts of the thesis it's obliged to indicate the name of the author.

Modelització i simulació fotoquímica mesoscalar del transport del material particulat i gasos a l'atmosfera

**Memòria realitzada per Raúl Arasa Agudo per optar al grau
de Doctor en Ciències Físiques.**

Programa de Doctorat: Meteorologia (2007-2011)

Barcelona, Juny de 2011

Doctorand:

Raúl Arasa Agudo

Directora:

Dra. Maria Rosa Soler Duffour

**Departament d'Astronomia i Meteorologia
Universitat de Barcelona**



3. Sistema de Modelització de la Qualitat de l'Aire

Com s'ha comentat anteriorment l'objectiu fonamental d'aquesta tesi era implementar i executar i validar un sistema de modelització de la qualitat de l'aire. En aquest capítol es presentarà en què consisteix el sistema i es descriuran els diferents models que el formen.

3.1. Descripció

Per poder fer ús dels sistemes de modelització com a eines de gestió i pronòstic mediambiental és necessari adaptar els models que el constitueixen a la zona d'interès, mitjançant l'ajust de paràmetres i l'estudi de les característiques dels episodis de contaminació.

Un sistema de modelització de la qualitat de l'aire acoblat de manera *off-line* consta de tres models diferents: un model meteorològic, un model d'emissió i un model fotoquímic. A vegades al model fotoquímic se l'anomena model de qualitat de l'aire per abús de llenguatge, però ell per sí sol no és executiu i necessita de les entrades meteorològiques i d'emissions per poder-lo executar. Així, mentre el model d'emissió subministra les emissions al model fotoquímic, el model meteorològic li subministra els camps meteorològics resolent les equacions primitives de la meteorologia dinàmica. Per últim, el model fotoquímic resol la equació de conservació de les diferents espècies a partir de la informació subministrada pels altres dos models. Primerament cal executar el model meteorològic, seguidament el model d'emissions que s'alimenta en una part de la sortida del model meteorològic i en darrer terme el model fotoquímic, que s'alimenta tant del primer model com del segon. El fet de que el model fotoquímic sigui el darrer mòdul del sistema que s'executa, provoca que hi hagi més incertesa en els resultats, ja que si algun dels dos primers mòduls conté errors, aquests es propagaran cap al resultat d'aquest últim.

El sistema de modelització de la qualitat de l'aire implementat (figura 3.1) està format per quatre models de tipologia diferent: dos models meteorològics, MM5 utilitzat en el sistema operatiu de pronòstic de la qualitat de l'aire aplicat a Catalunya, i WRF per aplicacions en estudis de recerca; un model d'emissió, MNEQA, creat des de la Universitat de Barcelona i amb important participació del doctorand; i un model fotoquímic, CMAQ.

Les simulacions que s'han realitzat durant aquesta recerca fonamental han tingut una durada de 48h, utilitzant el primer dia de simulació com *spin-up*. L'esquema de dominis del sistema és el descrit a la figura 3.2, amb 3 dominis aniuats de diferent resolució (taula 3.1). El domini D1 o domini exterior inclou la meitat sud d'Europa, la Península Ibèrica, gran part de França, Itàlia i una petita franja del continent Africà. La resolució de cada cel·la és de $27 \times 27 \text{ km}^2$, i n'hi ha 68 en la direcció Est/Oest i 44 en la direcció Nord/Sud. El domini D2 cobreix la vall de l'Ebre i part del sud de França, contenint 70×70 cel·les, i la resolució de cada cel·la és de $9 \times 9 \text{ km}^2$. El domini D3, conté 94×94 cel·les de resolució $3 \times 3 \text{ km}^2$, i cobreix tota Catalunya. En referència a la resolució vertical, s'inclouen 31 nivells, havent-hi uns 15 dins la capa límit i un primer nivell vertical a 16m.

S'ha de comentar que el sistema de modelització de la qualitat de l'aire implementat rep el nom d'AQM.cat quan l'àrea d'aplicació del sistema correspon a l'àrea de Catalunya segons la figura 3.2.

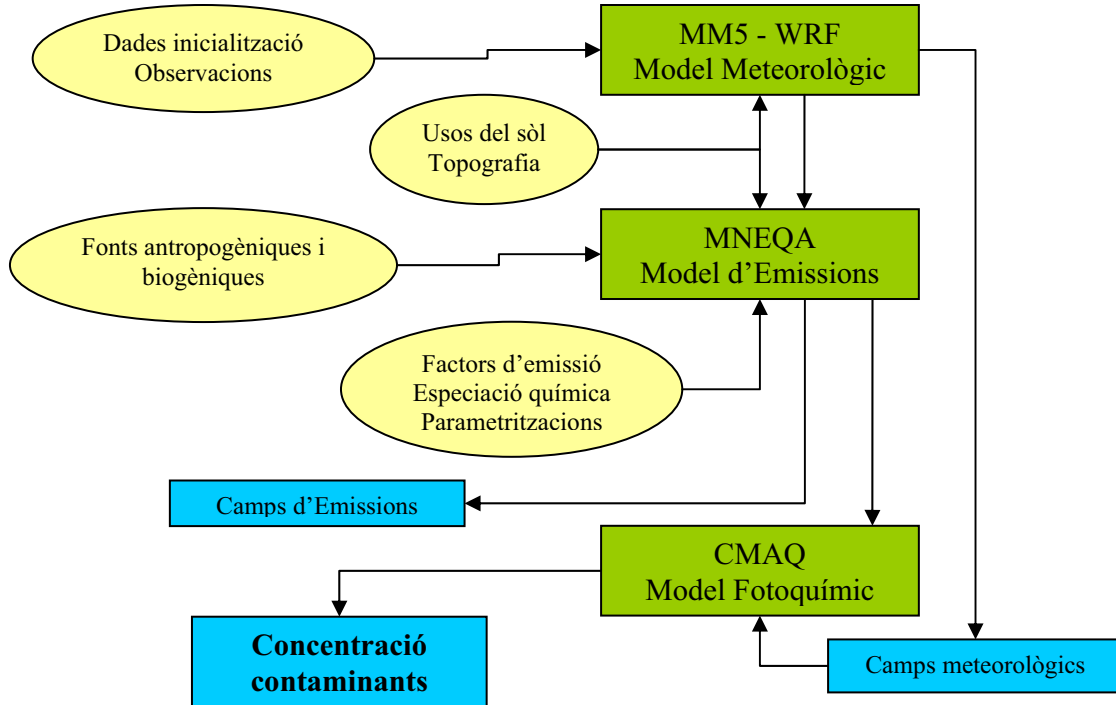


Figura 3.1. Esquema de funcionament del sistema de modelització de la qualitat de l'aire implementat

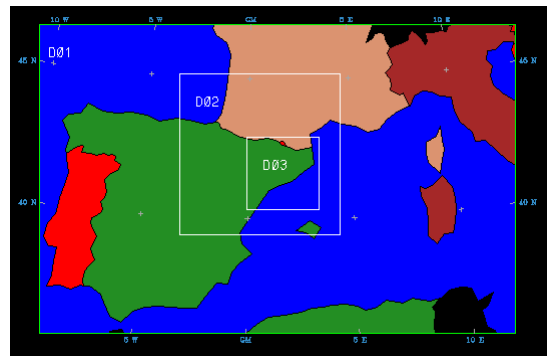


Figura 3.2. Esquema de dominis dels models.

Taula 3.1. Característiques específiques del sistema de modelització implementat

Domini D1	Domini D2	Domini D3
Resolució horitzontal 27km	Resolució horitzontal 9km	Resolució horitzontal 3km
31 nivells verticals	31 nivells verticals	31 nivells verticals
MM5 operatiu: Pronòstic 24h	MM5 operatiu: Pronòstic 24h	MM5 operatiu: Pronòstic 24h
Inicialització a les 00UTC	Inicialització a les 00UTC	Inicialització a les 00UTC

Amb la execució d'aquests tres tipus de models Eulerians s'aconsegueix obtenir el pronòstic dels camps meteorològics, d'emissions i de concentracions de diversos contaminants (figura 3.3).

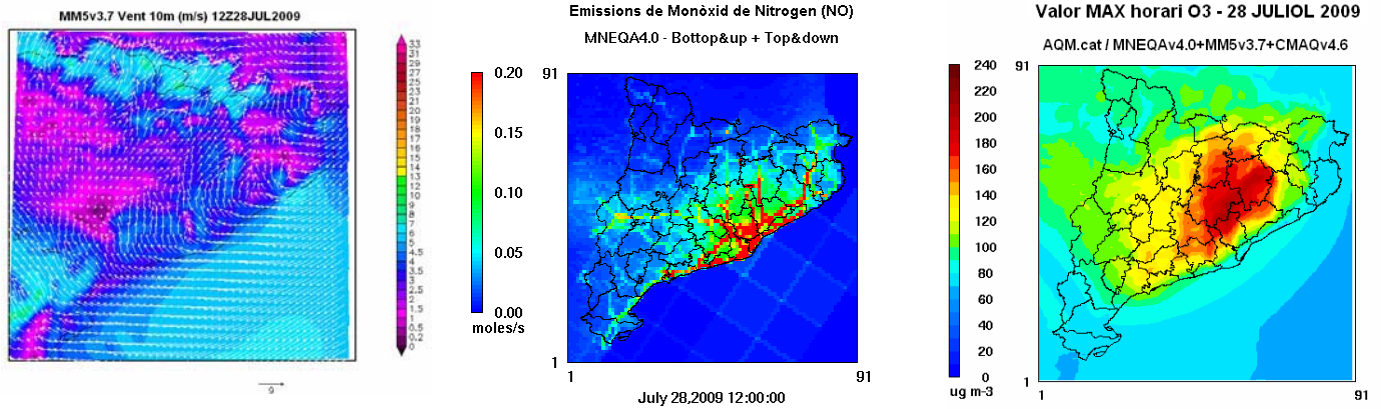


Figura 3.3. Pronòstic meteorològic, d'emissions i fotoquímic (d'esquerra a dreta respectivament) exemple d'AQM.cat.

En els apartats següents s'explicitaran algunes característiques de cadascun dels models utilitzats.

3.2. Model Meteorològic

El doctorand durant la fase de recerca ha treballat amb dos models meteorològics diferents. El model meteorològic MM5v3.7 utilitzat dins del sistema operatiu de modelització de la qualitat de l'aire AQM.cat (Arasa et al., 2007a, 2008, 2009a; Olid et al., 2010), i el model WRFv3.1.1 per a diferents aplicacions i estudis de recerca (Arasa et al., 2010c). Les opcions físiques de cadascun dels models utilitzades es presenten a la taula 3.2. A continuació es descriuen les característiques bàsiques d'aquests models.

Taula 3.2. Opcions físiques dels models meteorològics MM5 i WRF utilitzades.

Opcions físiques	MM5 operatiu	Configuracions WRF	
Cumulus	Grell (Grell., 1993)	Grell 3D (Grell i Debenyi, 2002)	
Esquema PBL	Medium Range Forecast Model (MRF; Hong i Pan, 1996)	WRF-1:Yonsei University (YSU; Hong et al., 2006)	WRF-2: Mellor-Yamada-Janjic (MYJ; Janjic, 2002)
		WRF-3: Asymmetrical Convective Model 2 (ACM2, Pleim, 2007a,b)	WRF-4: Quasi-Normal Scale Elimination (QNSE; Sukoriansky et al., 2006)
Microfísica	Schultz (Schultz, P., 1995)	Lin (Chen i Sun, 2002)	
Esquema radiació	RRTM lw (Mlawer et al., 1997) & Cloud-radiation sw (Dudhia, 1989)	RRTM lw (Mlawer et al., 1997) & RRTMG sw (Chou i Suarez, 1994)	
Esquema de sòl	Noah LSM (Chen i Dudhia, 2001)	Noah LSM (Chen i Dudhia, 2001)	
Esquema superficial	MM5 similarity (Paulson, 1970; Dyer i Hicks, 1970; Webb, 1970)	WRF-1: MM5 similarity (Skamarock et al., 2005)	WRF-2: Eta similarity (Janjic, 2002)
		WRF-3: Pleim-Xiu (Xiu i Pleim, 2001)	WRF4: QNSE (Sukoriansky, et al., 2005)

3.2.1. MM5

El model MM5 (Grell et al., 1994) és un model meteorològic de mesoscala de distribució lliure creat per la *Pennsylvania State University* (PSU) en col·laboració amb el *National Center for Atmospheric Research* (NCAR). És un model numèric no hidrostàtic, amb estructura modular (figura 3.4), d'àrea limitada, que permet fer simulació i predicció de les circulacions meteorològiques mesoscalars a l'atmosfera. És

un dels models que més s'ha utilitzat i que actualment encara s'utilitza conjuntament amb el model WRF en l'àmbit de la predicció numèrica del temps amb una elevada fiabilitat.

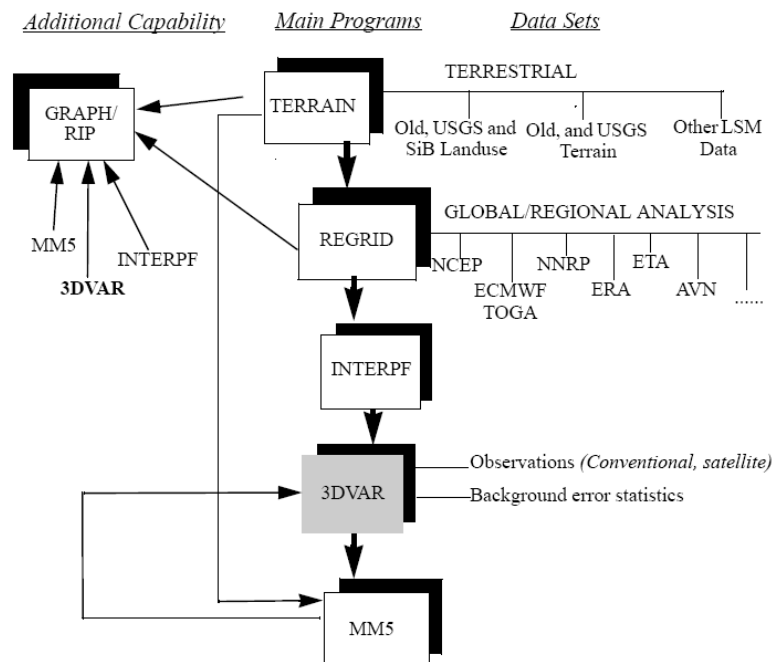


Figura 3.4. Representació esquemàtica de funcionament de MM5.

El model es basa en la resolució de les equacions primitives de l'atmosfera amb diferents parametritzacions físiques de capa límit, superfície, radiació, núvols, etc.

MM5 inclou com a arquitectura de dominis l'aniuament en una sola direcció (*one-way*) i en dues (*two-way*). L'aniuament assegura que, encara que s'obtingui un camp de vent en una regió concreta i relativament petita a una molt alta resolució, aquesta inclogui efectes introduïts per estructures orogràfiques que no estiguin contingudes en el domini de simulació amb més resolució però que modifiquen de manera important el règim circulatori que s'estableix. Si l'aniuament és en els dos sentits (*two-way nesting*), la influència és mútua, com s'ha utilitzat sobre els dominis D2 i D3.

El model necessita com a dades d'entrada algunes dades físiques dels territoris que comprenen els diferents dominis de simulació com: l'elevació del terreny, usos del sòl, diversos índex associats a la vegetació i d'altres dades climàtiques.

La seva inicialització requereix de dades de condicions inicials i de contorn. Aquestes dades es poden obtenir a partir de simulacions prèvies amb el mateix model o a partir de models d'escala global com per exemple, GFS (*Global Forecast System*) o ECMWF (*European Centre for Medium Range Weather Forecasts*). Alhora té la capacitat d'incorporar assimilació variacional de dades observacionals, de forma que es poden millorar els pronòstics meteorològics utilitzant les dades reals (com radiosondatges o mesures en superfície de variables meteorològiques per exemple). Durant el pronòstic operatiu les simulacions del domini superior D1 han estat executades pel Servei Meteorològic de Catalunya utilitzant inicialització mitjançant les dades ECMWF i assimilant dades observacionals per millorar la qualitat dels pronòstics.

MM5 és un model aplicable a qualsevol regió del món, presenta múltiples opcions de projecció geogràfica i permet obtenir amb una elevada resolució horitzontal i vertical les diferents variables atmosfèriques.

Pel que respecta a les seves característiques tècniques és un model programat en llenguatge Fortran que s'ha d'executar en entorns Unix/Linux i amb capacitat per executar-ho en paral·lel.

3.2.2. WRF

El model WRF (Skamarock i Klemp, 2008) és un model meteorològic no hidrostàtic de nova generació desenvolupat pel *National Center for Atmospheric Research* (NCAR). Es tracta d'un model de lliure distribució i codi obert, amb capacitat per execucions en mode multi-tasca sobre computadors de memòria compartida o distribuïda. WRF presenta un codi basat en mòduls (figura 3.5), de forma semblant al model MM5, i es pot utilitzar per a la realització de la previsió meteorològica operativa i per a estudis de simulacions ideals en estudis de recerca.

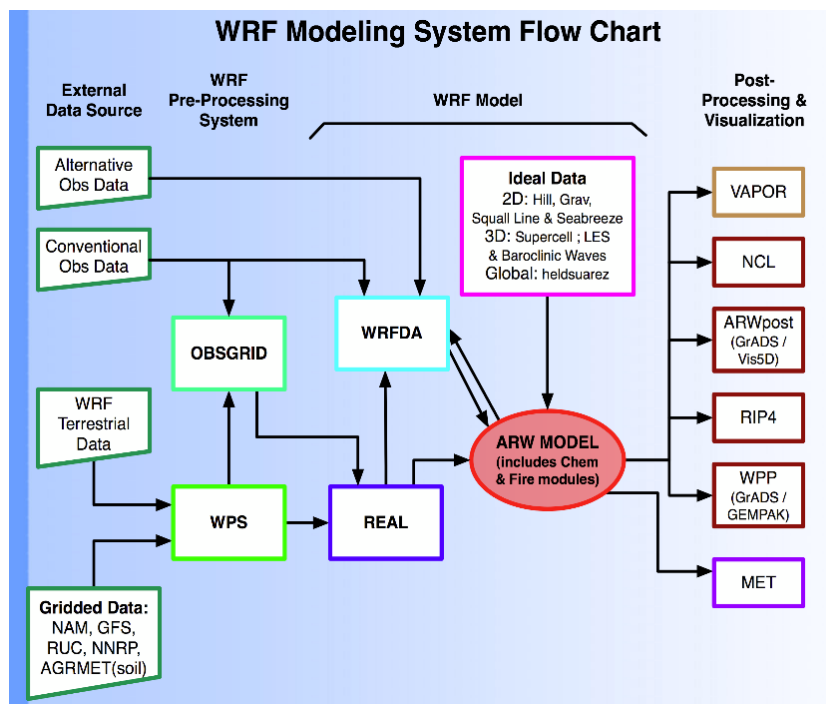


Figura 3.5. Representació esquemàtica de funcionament de WRF-ARW.

El doctorand ha treballat amb el nucli ARW (*Advanced Research WRF*) que inclou com a arquitectura de dominis l'aniuament en una sola direcció (*one-way*), en dues (*two-way*) i mòbil. S'ha utilitzat l'aniuament en dues direccions i l'esquema de dominis de la figura 3.2. S'ha utilitzat el model WRF en mode no operatiu per estudiar i comparar la sensibilitat dels sistemes de modelització MM5-MNEQA-CMAQ i WRF-MNEQA-CMAQ a diferents esquemes de capa límit i superficial a l'àrea de Catalunya (capítol 8), i avaluar així la possibilitat de incloure el model WRF en el sistema operatiu de pronòstic de la qualitat de l'aire.

Es tracta d'un model que incorpora els últims avenços en física de l'atmosfera per resoldre les equacions primitives de la meteorologia dinàmica, incorpora noves parametritzacions o millora les parametritzacions ja existents del MM5 i permet també l'assimilació variacional de dades observacionals.

Similarment al model MM5, WRF necessita de dades d'entrada tant físiques sobre el territori de simulació, com inicials i de contorn, havent estat utilitzades les dades del ECMWF per inicialitzar-ho. També és un model aplicable a qualsevol regió del món i admet múltiples projeccions geogràfiques.

WRF és un model programat en llenguatge Fortran que s'ha d'executar en entorns Unix/Linux i amb capacitat per executar-se en paral·lel, obtenint la sortida en format netCDF.

3.3. MNEQA: Model Numèric d'Emissions per la Qualitat de l'Aire

El Model Numèric d'Emissions pel la Qualitat de l'Aire (MNEQA) (Ortega, 2009a; Ortega et al., 2009b) és el model d'emissions desenvolupat pel grup MAiR, que permet el càlcul de les emissions que s'injecten a l'atmosfera dintre d'un ampli ventall d'espècies químiques corresponents a gasos i aerosols.

MNEQA ha estat desenvolupat pel grup MAiR durant els últims anys a la Universitat de Barcelona amb fons dels convenis de col·laboració de l'antic Departament de Medi Ambient i Habitatge de la Generalitat de Catalunya i el Servei Meteorològic de Catalunya i de diversos projectes CICYT del *Ministerio de Ciencia e Innovación* del *Gobierno de España*. El doctorand ha format part de la seva elaboració prèvia, l'automatització i conjunció dels diferents mòduls que el componen i dels canvis i millores soferts des de la primera versió fins a l'actual MNEQAv4.0. Al capítol 4 s'explicitaren les contribucions personals del doctorand al model.

MNEQA inclou tant les emissions procedents de fonts naturals (com les partícules procedents de la pols o els hidrocarburs emesos per la vegetació) com les procedents de fonts antropogèniques (trànsit i indústria principalment).

El model MNEQA està preparat per calcular les emissions mitjançant la metodologia *bottom-up* a l'àrea de Catalunya. Aquesta metodologia es basa en el càlcul de les emissions de cada tipus de font de forma particular utilitzant la informació local. Es consideren:

- Les emissions de trànsit calculades a partir de factors d'emissió utilitzant dades d'intensitat mitges diàries de les diferents carreteres i el parc de vehicles; juntament amb les emissions procedents de la resuspensió a les vies i a les emissions evaporatives dels vehicles.
- Les emissions industrials procedents del inventari d'emissions industrials de la Generalitat de Catalunya.
- Les emissions degudes al consum domèstic, calculades a partir de factors d'emissió i dades de població.

- Les emissions naturals utilitzant parametritzacions, dades fisiogràfiques del territori i el pronòstic de diferents variables meteorològiques procedents del model meteorològic.

MNEQA també incorpora la metodologia *top-down* (Arasa et al., 2010b) per disgregar les emissions d'espècies contaminants a l'atmosfera a nivell europeu que es recullen al inventari anual EMEP/CORINAIR (European Environmental Agency, 2007) utilitzant un model de disgregació. El utilitzat per MAiR pren com a base els usos del sòl CLC2000 (*Corine Land Class 2000*) de resolució 250m, acoblat a diferents funcions pes estadístiques calculades a partir de diferents variables soci-econòmiques (capítol 4). De forma que MNEQA pot disgregar les emissions EMEP/CORINAIR per tota la Península Ibèrica i incorpora les emissions de fonts no calculades mitjançant *bottom-up* a les emissions de l'àrea de Catalunya.

Quan es desconeix la distribució temporal de les emissions, MNEQA incorpora perfils horaris, diaris i mensuals procedents del model EMEP (<http://www.emep.int/OpenSource/index.html>).

D'altra banda les emissions en alçada es distribueixen en funció de diferents nivells verticals, sempre tenint en compte els definits al model fotoquímic. La resolució horitzontal del model és de 3km, tot i que està preparat per treballar a resolucions inferiors, fins a 1 km.

MNEQA presenta una estructura modular (figura 3.6) ja adaptada per a la entrada dels models meteorològics MM5 i WRF; està escrit en llenguatge Fortran 90; la sortida està escrita en format netCDF i ASCII; i calcula les emissions en funció de la especiació química requerida pel mecanisme químic CBM-V del model fotoquímic CMAQ, tot i que és fàcilment adaptable a qualsevol especiació química utilitzada per d'altres models.

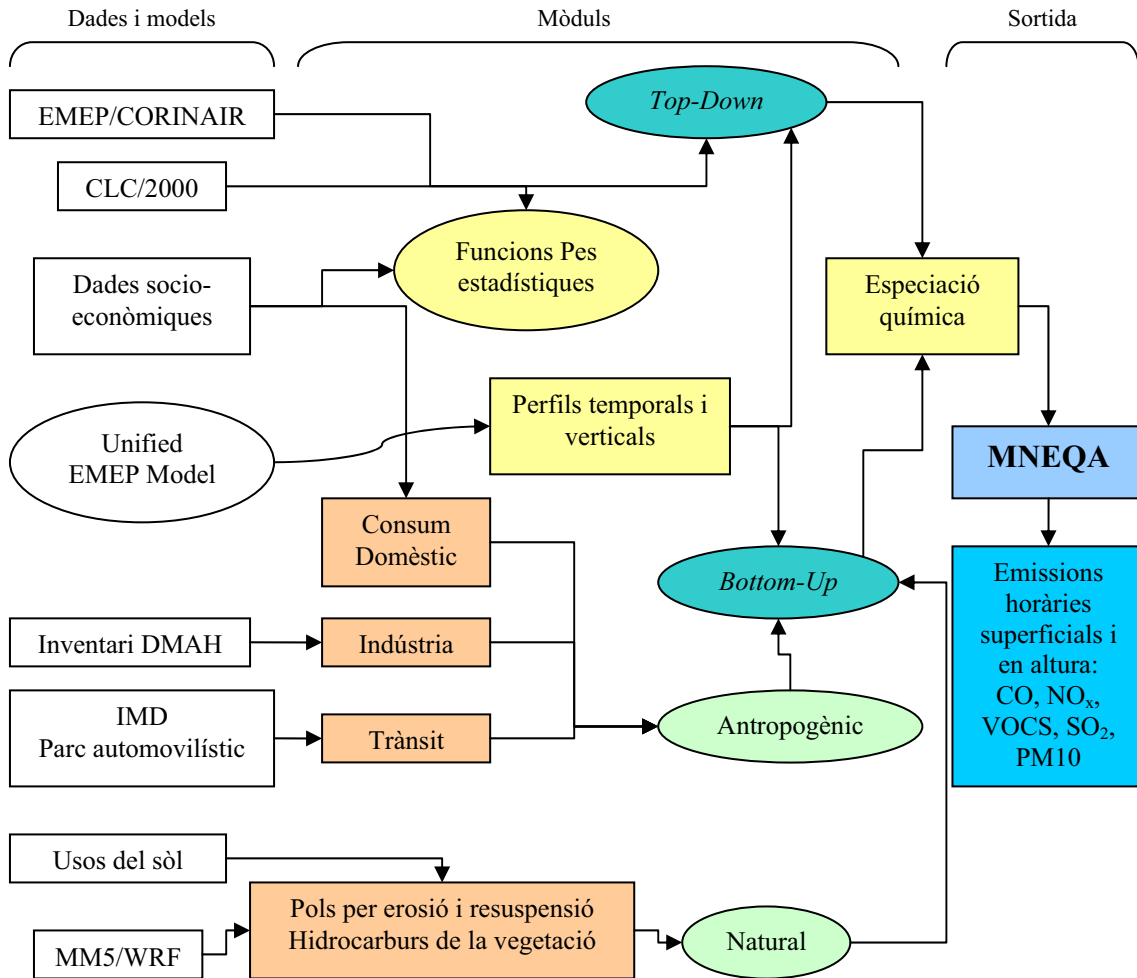


Figura 3.6. Representació esquemàtica de funcionament de MNEQA.

Així, a la sortida de MNEQA les partícules ja queden especiades no tan sols en funció de la seva grandària, PM2.5 i PM10, sinó químicament diferenciant entre: partícules sulfatoses, PSO4; partícules nitrats, PNO3; partícules procedents de carbó elemental, PEC; partícules orgàniques, POA; i la resta de PM2.5 que no són cap de les anteriors s'agrupen com a PMFINE. Per tant, juntament amb les PM10, l'especiació dins del model d'emissions, es realitzarà segons una classificació de sis termes.

La especiació dins de les PM2.5, normalment es realitza gràcies a uns *factors splits*, que no són més que uns factors de desdoblament en tant per u per tenir en compte la contribució de cada tipus dins de les PM2.5, diferenciat per la font i per les característiques particulars de la font emissora en qüestió (Arasa, 2007b).

En el cas dels gasos, les espècies que es consideren són: l'amoníac, NH₃; el monòxid de carboni, CO; el monòxid de nitrogen, NO; el diòxid de nitrogen, NO₂; el diòxid de sofre, SO₂; els sulfurs; i tota una sèrie d'espècies químiques dins de la família dels compostos orgànics volàtils, VOCs (aldehids, ALD2, etè, ETH, formaldehid, FORM, isoprè, ISOP, hidrocarburs no reactius, NR, olefines, OLE, parafines, PAR, toluè, TOL, i xilè, XYL) que requereixen d'una especiació particular similar a la comentada per les PM2.5 (Arasa et al., 2007a).

3.4. CMAQ: Model Fotoquímic

CMAQ (Byun i Ching, 1999), és un model fotoquímic desenvolupat per la *Environmental Protection Agency* (EPA), de lliure distribució i de codi obert, de tal forma que l'usuari pot realitzar les modificacions convenientes i a la vegada es van incorporant noves modificacions des del centre de distribució. Aquest model permet solucionar l'equació de conservació de les diferents espècies de contaminants a l'atmosfera en el sistema de coordenades generalitzades considerant que:

- La concentració de contaminants és suficientment petita com per a que no afecti considerablement a la meteorologia (acoblament *off-line*).
- Les velocitats i concentracions de les espècies són quantitats turbulentes a l'atmosfera i la difusió molecular és negligible.
- El tensor mètric que defineix la transformació de coordenades no és una variable turbulenta, per tant, podem definir la transformació en base a valors mitjos.
- La turbulència és considerada estadísticament homogènia i estacionària, és a dir, ergòdica.
- La turbulència és estacionària en el període de temps considerat.
- Les emissions són deterministes, sense component turbulenta.
- L'efecte de la fluctuació de la concentració sobre la velocitat de les reaccions és negligible.
- Els processos físics i químics es descomponen en les direccions horitzontals i verticals degut a que els moviments a gran escala a l'atmosfera són quasi-horitzontals respecte la superfície terrestre.

Amb aquestes consideracions acceptades, el model treballa segons l'esquema de funcionament de la figura 3.7 i amb *one-way nesting* (aniuament en una sola direcció) com a arquitectura dels dominis. A continuació explicitem les característiques bàsiques de cada mòdul:

- ECIP: és capaç de gestionar internament les emissions, tot i que també les pot gestionar d'un model d'emissió independent.
- MCIP: s'encarrega d'adaptar la sortida meteorològica de MM5 o WRF per CMAQ.
- JPROC: calcula els paràmetres que depenen de la radiació solar (fotòlisi).
- BCON: és l'encarregat de determinar les condicions de contorn, ja sigui utilitzant dades per defecte o mitjançant les simulacions de dominis superiors.
- ICON: és l'encarregat de determinar les condicions inicials, ja sigui utilitzant l'atmosfera neta com a dada per defecte o mitjançant les dades de concentració simulades en un període anterior.
- PDM – *plume in grid* (opcional): tracta de forma particular emissions de fonts individuals emeses a una alçada considerable per tal que no es mesclin instantàniament i evitant així una mescla excessiva, el tractament és similar a un model gaussià fins que el plomall no té les dimensions d'una cel·la del domini. Recomanat per resolucions horitzontals superiors a 10km.
- CCTM: mòdul que integra les sortides dels mòduls previs. Les sortides són les concentracions dels diversos contaminants atmosfèrics.

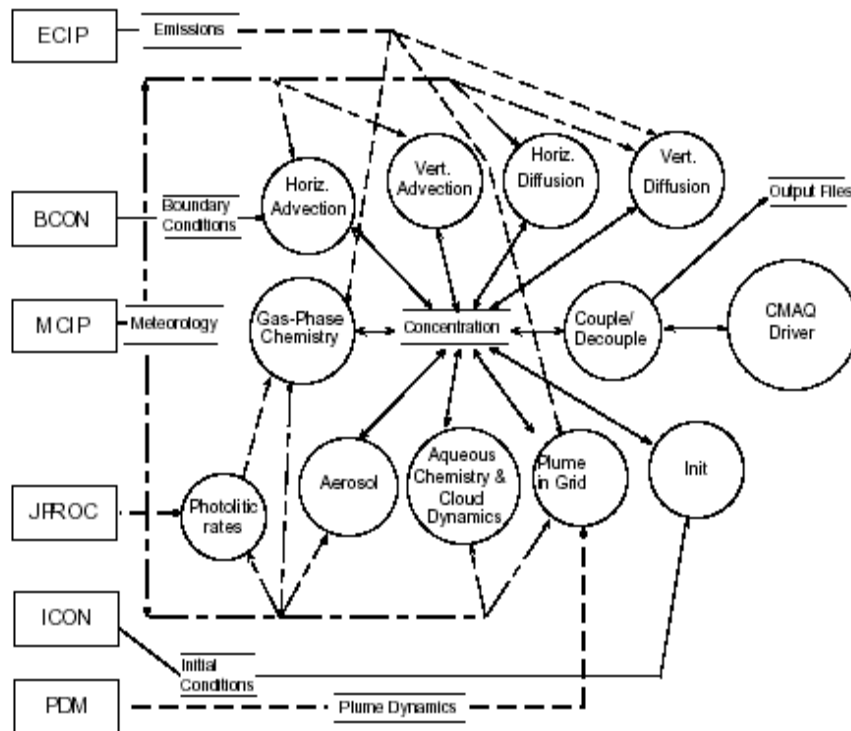


Figura 3.7. Esquema de funcionament bàsic del model CMAQ.

El model necessita com a entrada els valors de diferents variables meteorològiques proporcionades per la sortida del model meteorològic (MM5 o WRF, amb acoblament *off-line*) i els valors d'emissió de les diferents espècies químiques proporcionades per un model d'emissió, com per exemple MNEQA.

Les simulacions realitzades amb el model CMAQ permeten obtenir les concentracions de diferents espècies químiques en diferents intervals temporals, tant de gasos com de partícules, juntament amb deposicions seques i humides, i visibilitat.

CMAQ és un model escrit en Fortran 90, es pot executar en paral·lel i el format dels fitxers de sortida és netCDF. El doctorand ha utilitzat la versió CMAQv4.6 durant la seva etapa de recerca.

Els mecanismes químics amb els que pot treballar el model CMAQ en la versió 4.6 són: CB-IV, CBM-V i SAPRC pel tractament dels gasos; i AERO3 i AERO4 pel tractament del material particulat. A continuació s'explicitaran les diferents espècies químiques resultants del model CMAQ de les que podem avaluar la concentració.

3.4.1. Mòdul d'aerosols

El mòdul d'aerosols del model CMAQ deriva del *Regional Particulate Model* (RPM, Binkowski i Shankar, 1995). En el model CMAQ es consideren les partícules distribuïdes en tres modes amb subdistribucions logarítmic normals i en dos grups diferenciats, les partícules fines i les grans, amb mecanismes de generació i característiques químiques diferents. El grup de les partícules fines a la vegada està dividit en dos modes, el d'Aitken i el d'acumulació, generades a partir de nucleació per exemple, i que interactuen entre ells mitjançant coagulació. Cada mode pot créixer a

partir de condensació de gasos precursors sobre partícules ja existents (reaccions en la superfície de la partícula) o mitjançant reaccions en fase aquosa, i està subjecte a deposició seca i humida.

El mòdul d'aerosols per la execució del model CMAQv4.6 escollit és l'AERO4, ja que incorpora un tractament de les emissions de partícules marines i millores en el tractament de l'equilibri termodinàmic entre el mode acumulació i la fase gas respecte AERO3. Les espècies aerosol resultants de la execució del model CMAQv4.6 amb el mòdul AERO4 activat són descrites a la taula 3.3. De forma que la concentració de partícules PM10 resultant de la simulació és la suma de totes les espècies aerosol en els modes Aitken, acumulació i grans.

Taula 3.3. Espècies d'aerosol obtingudes amb el model CMAQv4.6 amb el mòdul AERO4 activat. Unitats: massa [$\mu\text{g m}^{-3}$] i número [m^{-3}]

Espècie	Descripció
ASO4J	Massa sulfatosa en mode acumulació
ASO4I	Massa sulfatosa en mode Aitken
ANH4J	Massa d'amoni en mode acumulació
ANH4I	Massa d'amoni en mode Aitken
ANO3J	Massa nitrat en mode acumulació
ANO3I	Massa nitrat en mode Aitken
AORGAJ	Massa orgànica secundària antropogènica en mode acumulació
AORGAI	Massa orgànica secundària antropogènica en mode Aitken
AORGAJ	Massa orgànica primària en mode acumulació
AORGAJ	Massa orgànica primària en mode Aitken
AORGBJ	Massa orgànica secundària biogènica en mode acumulació
AORGBI	Massa orgànica secundària biogènica en mode Aitken
AECJ	Massa de carbó elemental en mode acumulació
AECI	Massa de carbó elemental en mode Aitken
A25J	Massa antropogènica sense especificar en mode acumulació
ACORS	Massa antropogènica sense especificar en mode gran
ASOIL	Massa derivada del terra en mode gran
NUMATKN	Número en mode Aitken
NUMACC	Número en mode acumulació
NUMCOR	Número en mode gran
SRFATKN	Superfície en mode Aitken
SRFACC	Superfície en mode acumulació
AH2OJ	Massa aquosa en mode acumulació
AH2OI	Massa aquosa en mode Aitken
ANAJ	Massa de sodi marí en mode acumulació
ACLJ	Massa de clor marí en mode acumulació
ANAK	Massa de sodi marí en mode gran
ACLK	Massa de clor marí en mode gran
ASO4K	Massa sulfatosa en mode gran

3.4.2. Mòdul de gasos

En el cas dels gasos, les simulacions del model fotoquímic CMAQ s'han executat amb el mòdul de tractament de gasos *Carbon Bond Mechanism 05* (CBM-V) activat, que diferencia entre diverses espècies de gasos que a continuació explicitem (taula 3.4).

Taula 3.4 Espècies de gasos obtingudes amb el model CMAQv4.6 amb el mòdul CBM-V activat.

Espècie	Descripció
NO2	Diòxid de nitrogen
NO	Òxid de nitrogen
O	Oxigen atòmic (triplet)
O3	Ozó
NO3	Triòxid de nitrogen
O1D	Oxigen atòmic (singlet)
OH	Radical hidroxil
HO2	Radical hidroperoxil
N2O5	Pentòxid de nitrogen
HNO3	Àcid nítric
HONO	Àcid nítrós
PNA	Àcid peroxinítric
H2O2	Peròxid d'hidrogen
XO2	Operador NO a NO2
XO2N	Operador NO a Nitrat
NTR	Nitrat orgànic- Alkyl nitrat
ROOH	Hidroperòxid orgànic
FORM	Formaldehid
ALD2	Acetaldehid i altres aldehids
ALDX	Espècies d'aldehids amb pes molecular més alt
PAR	Parafina
CO	Monòxid de carboni
MEO2	Radical peroxi-metil
MEPX	Metilhidroperòxid
MEOH	Metanol
HCO3	Residu de HO2 més formaldehid
FACD	Àcid fòrmic
C2O3	Radical acil-peroxi
PAN	Peroxiacetil nitrat
PACD	Àcid peroxi-acètic
AACD	Àcid acètic i amb pes molecular més alt
CXO3	Radical acetil-peroxi amb pes molecular més alt
PANX	Espècies de peroxiacetil nitrat amb pes molecular més alt
ROR	Radical oxi orgànic secundari
OLE	Olefina
ETH	Etè
IOLE	Espècies d'olefines internes
TOL	Toluè
CRES	Cresol i fenols amb pes molecular més alt
TO2	Radical hidroxil toluè
OPEN	Compostos aromàtics amb alt pes molecular
CRO	Metil-fenoxi radical
MGLY	Metil glioxal
XYL	Xilè
ISOP	Isoprè
ISPD	Productes de les reaccions d'isoprens
TERP	Monoterpens
SO2	Diòxid de sofre
SULF	Àcid sulfúric
ETOH	Etanol
ETHA	Etè
NH3	Amoníac
HCL	Àcid clorhídric

S'ha escollit la versió 5 del mecanisme carbon bond com a mòdul de gasos ja que per una banda proporciona millors resultats que CB-IV (Sarwar et al., 2008) especialment pel que respecta a l'ozó durant l'estiu, incrementant els valors pronosticats en un 8%; i per l'altra perquè SAPRC sobreestima les concentracions d'ozó troposfèric en àrees urbanes (Luecken et al., 2008).

3.5. Especificacions tècniques del sistema de modelització

El sistema de modelització implementat, tant per la realització de les previsions diàries dels principals contaminants atmosfèrics com per les aplicacions en estudis de recerca, s'ha implementat en el clúster de computadores del Departament d'Astronomia i Meteorologia de la Universitat de Barcelona. De forma que tant el model meteorològic com el model fotoquímic funcionen en paral·lel amb una mitja de 12 processadors útils sobre un entorn Linux. A continuació citem les característiques bàsiques d'aquest clúster:

- Consta de 7 nodes (1 principal i 6 secundaris), cada node té dos processadors Dual Core, o sigui $2 \times 2 = 4$ processadors per node. Per tant, si tenim $6 \times 4 = 24$ processadors reals disponibles es pot portar a terme el càlcul en paral·lel. Si tenim en compte que té *multi-threading*, o sigui que pot arribar a simular 8 per node, tindríem 48 processadors virtuals. El node principal és independent i serveix per fer compilacions.
- Està instal·lat el sistema operatiu CentOS (linux distribució red hat) amb un gestor de nodes anomenat *rocks*.
- Està especialment preparat per llençar processos de càlcul llargs que tinguin la necessitat de utilitzar molta cpu i memòria.
- El servidor accepta paral·lelisme mitjançant llibreries mpi i openmp.
- Per llençar processos utilitza un gestor de cues (qsub).
- I el software de programació que hi ha instal·lat és el Fortran (77 i 90), el Intel Fortran, el C i el Java.

