

## El modelo de transporte químico MOCAGE

MOCAGE (Modélisation de la Chimie Atmosphérique Grande Echelle) (Josse et al., 2004) es un modelo tridimensional de transporte y química atmosférica desarrollado por Météo-France, de reconocido prestigio, y cuyo uso ha sido cedido a la AEMET a través de un acuerdo de colaboración entre ambas instituciones, tanto para investigación como para aplicaciones operacionales en el campo medioambiental.

MOCAGE es un modelo global con la opción de hasta tres niveles de anidamiento, lo cual permite que se pueda ejecutar al mismo tiempo para varios dominios, cada vez más reducidos pero con una mayor resolución espacial. Este modelo proporciona simulaciones numéricas de las interacciones entre los procesos dinámicos, físicos y químicos en la Troposfera y la Estratosfera, tanto para gases como para aerosoles. Cuenta con una estructura vertical de 47 niveles híbridos que se extienden desde la superficie hasta 0.1hPa (aproximadamente 60Km), con 8 niveles por debajo de 2km, siendo el espesor de la capa más cercana al suelo de 40 metros (ver Figura 1).

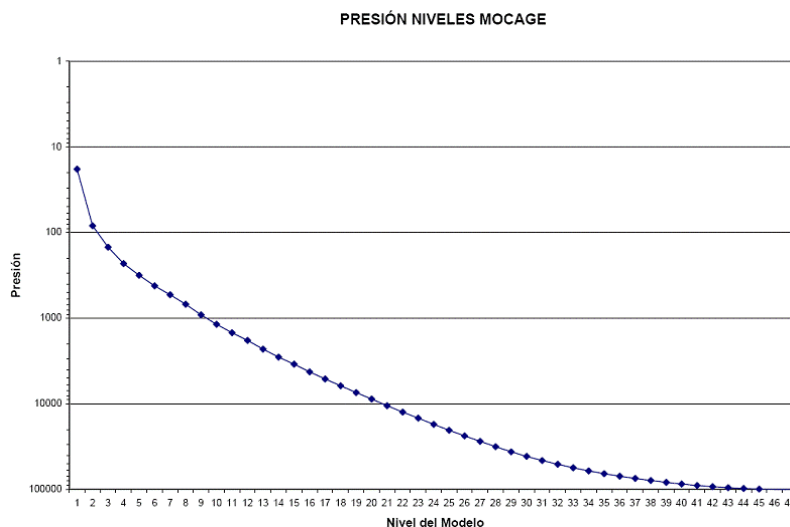


Fig. 1 – Distribución vertical de los 47 niveles híbridos usados en MOCAGE

MOCAGE presenta la posibilidad de poder ser ejecutado en modo *on-line*, acoplado de forma interactiva a un modelo de circulación general para obtener directamente los campos meteorológicos, de uso por ejemplo en estudios climáticos. También puede usarse en modo *off-line*, opción implementada en AEMET, en la cual es forzado externamente por los campos generados por un modelo meteorológico ejecutado por separado (ECMWF, HARMONIE-AROME, ARPEGE,...)

Las concentraciones de los componentes químicos en las condiciones iniciales se obtienen a partir de las predicciones a H+24 generadas por el propio modelo en la pasada del día anterior, aunque cabe mencionar que el modelo dispone de la posibilidad de incluir la asimilación de datos para esta inicialización de los datos químicos. Esta opción no se encuentra implementada en AEMET actualmente.

El esquema químico usado es RACMOBUS que comprende 119 especies y 372 reacciones y fotólisis. Este esquema es una combinación del esquema de RACM para la química troposférica (Stockwell et al., 1997) y el esquema REPROBUS (Lefèvre et al., 1994) para las reacciones relativas a la química estratosférica.

Las parametrizaciones físicas de MOCAGE comprenden los siguientes esquemas relativos a procesos físicos: esquema de advección semi-lagrangiano (Williamson and Rash, 1989), difusión turbulenta mediante el esquema de difusión de Louis (Louis, 1979) y procesos convectivos mediante el esquema KFB (Kain-Fritsch-Bechtold) (Bechtold et al., 2001).

También incluye los procesos de eliminación de especies químicas siguiendo el esquema de Wesely para deposiciones secas, basado en un método de resistencias superficiales (Wesely, 1989), y procesos de deposición y eliminación húmeda, tanto para nubes convectivas (Mari et al., 2000) como en nubes estratiformes (Giorgi and Chameides, 1986).

El inventario de emisiones es un punto crucial a la hora de calcular predicciones de calidad del aire. Las emisiones de los componentes químicos se estiman mediante el inventario de emisiones global del IPCC / EMEP con una resolución de 50 km, y, desde el 19 de noviembre de 2016, con el inventario de TNO-MACC-III, generado por la empresa holandesa TNO para el proyecto europeo MACC-III (Monitoring Atmospheric Composition and Climate), tomando como año base 2011, para el área de Europa con una resolución horizontal nativa aproximada de 7 km, estimando en todos los casos emisiones únicamente en superficie.

Cada día se calculan las emisiones diarias correspondientes a partir de dicho fichero que contiene las emisiones en la resolución de trabajo, sobre cada punto de rejilla del nuevo dominio, teniendo en cuenta el mes y el día de la semana. Las emisiones diarias están separadas en “*snap\_sectors*”, que dan cuenta del sector (agricultura, industria, tráfico, etc.) del que proceden dichas emisiones. Además se aplican unos factores horarios, que dependen del “*snap\_sector*” y de la especie química considerada, por lo que finalmente se dispone de emisiones horarias para cada especie. Este inventario es el que se utiliza en la mayoría de los modelos europeos.

Aunque estas emisiones son estimaciones más actuales que las que se empleaban con anterioridad, debido a los cambios experimentados en las emisiones de las diferentes especies químicas en los últimos años, este inventario puede producir errores en los valores previstos de parámetros relacionados con la calidad del aire.

Por último, es importante mencionar la incertidumbre asociada a estas predicciones debida a factores tales como la necesidad de datos reales para inicializar el modelo, la disposición de un inventario actualizado o la complejidad de la interacción de los procesos químicos con los procesos físicos de la atmósfera, etc. Como consecuencia se trata de predicciones de carácter más cualitativo que cuantitativo, que muestran tendencias espaciales y temporales más que valores absolutos y que por tanto no pueden usarse para determinar la posible superación de valores legislados. Tanto AEMET como la DGCEA trabajan conjuntamente en el desarrollo de nuevas versiones que permitan la mejora progresiva de estas predicciones.

### La configuración de MOCAGE en AEMET

La configuración desarrollada en AEMET consiste en el uso de MOCAGE como modelo global con una resolución de 2° (alrededor de 200km en nuestras latitudes), con forzamientos dinámicos en altura provenientes de las salidas del modelo IFS (Integrated Forecast System) HRES (High Resolution) del Centro Europeo de Predicción a Plazo Medio (ECMWF, siglas en inglés) con resolución horizontal de alrededor de 9km en nuestras latitudes y forzamientos en superficie del modelo ARPEGE de Météo-France. A esta configuración se la denomina dominio Global.

Anidado al anterior, se ejecuta una segunda configuración correspondiente a un dominio denominado Continental (ver Figura 2) que abarca gran parte de Europa y parte del Atlántico Norte (40W-26E, 24N-60N), con una resolución de 0,5° (50km), usando como forzamientos dinámicos, tanto en altura como en superficie, las salidas del modelo IFS HRES del Centro Europeo de Predicción a Plazo Medio con resolución horizontal de alrededor de 9km en nuestras latitudes.

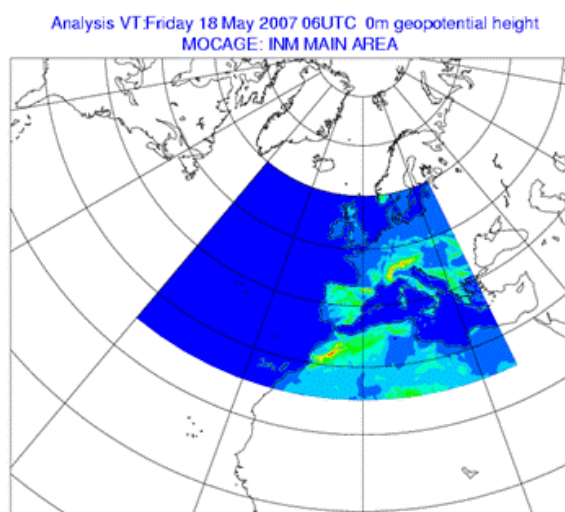


Fig. 2 – Dominio Continental de 0,5° usado para el modelo MOCAGE en AEMET

Por último, anidado al anterior dominio, se ejecuta una tercera configuración correspondiente a un dominio denominado Regional (ver Figura 3) que abarca la Península Ibérica (15W-10E, 33N-46N), con una resolución de 0,1° (10km). Para este dominio, los forzamientos dinámicos provienen de las salidas numéricas del modelo HARMONIE-AROME operativo en AEMET con una resolución horizontal de 2.5km.

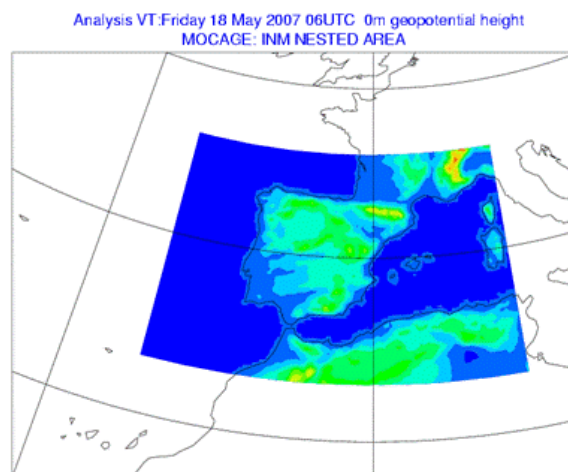


Fig. 3 – Dominio Regional de 0,1° usado para el modelo MOCAGE en AEMET

Esta última configuración es la que se utiliza para la elaboración de los mapas de pronóstico de calidad del aire que se publica en la página web de la Agencia Estatal de Meteorología.

No se ha desarrollado una versión operativa del modelo MOCAGE equivalente que cubra las Islas Canarias porque no existe un inventario de emisiones sobre Canarias de la adecuada calidad y resolución espacial. Los inventarios de emisiones son un factor capital en la bondad de las predicciones de un modelo de composición química de la atmósfera. Se procederá a poner en marcha un sistema similar al actual, particularizado para las Islas Canarias, cuando exista un inventario de emisiones de la debida resolución horizontal.

### **Los productos de MOCAGE en AEMET**

Como se ha comentado en el párrafo anterior, todos los productos generados a partir del modelo MOCAGE que están disponibles en la página web de AEMET, corresponden a la configuración del dominio Regional (resolución 0,1°) y se ejecuta diariamente para las pasadas de las 00 y 12 UTC, con un alcance de hasta 48 horas, generando salidas gráficas horarias de las concentraciones en superficie de NO<sub>2</sub>, NO, O<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>, CO, PM10 y PM2.5 expresadas en µg/m<sup>3</sup>.

El SO<sub>2</sub> se ha incluido debido a que el último inventario de emisiones recoge el importante descenso de emisiones que ha tenido lugar en España en la pasada década y, por tanto, se considera que el producto tiene una calidad aceptable en la mayoría del territorio. Aun así, existen zonas en las que las emisiones de este contaminante recogidas en el inventario de emisiones que utilizamos son

excesivas y pueden dar lugar a niveles previstos de SO<sub>2</sub> demasiado elevados y no realistas en comparación con los observados.

En las figuras 4 a 10 se muestran las salidas gráficas generadas por el modelo MOCAGE y que se publican diariamente en la web externa de AEMET para cada una de las especies mencionadas anteriormente.

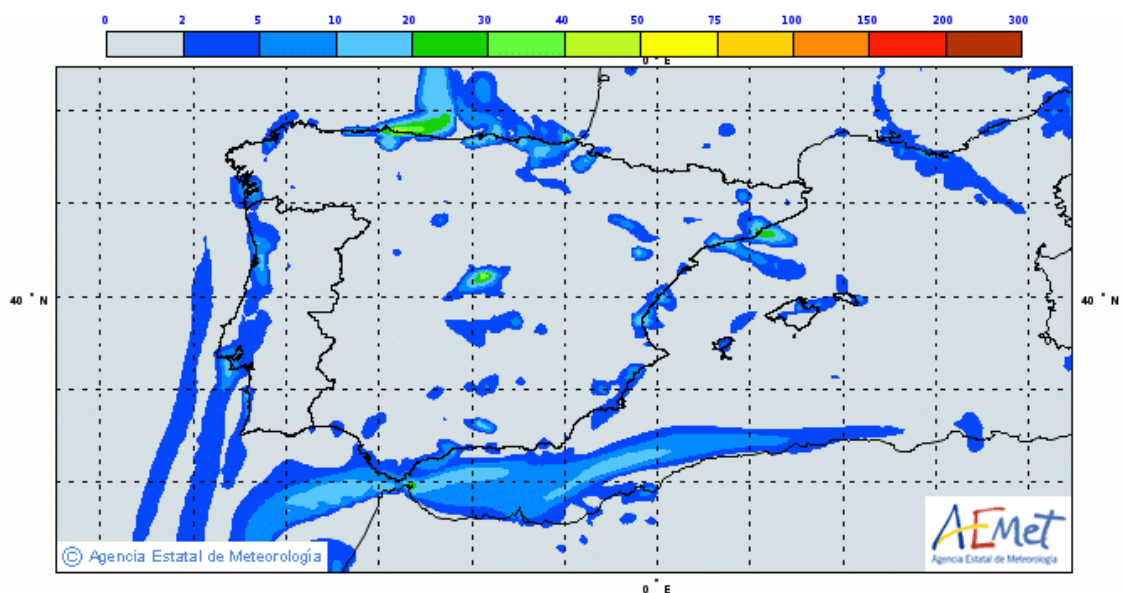


Fig. 4 – Concentraciones previstas en superficie de NO<sub>2</sub> (µg/m<sup>3</sup>) generados por MOCAGE en el dominio Regional para el día 14 de agosto de 2019 a las 12 horas UTC.

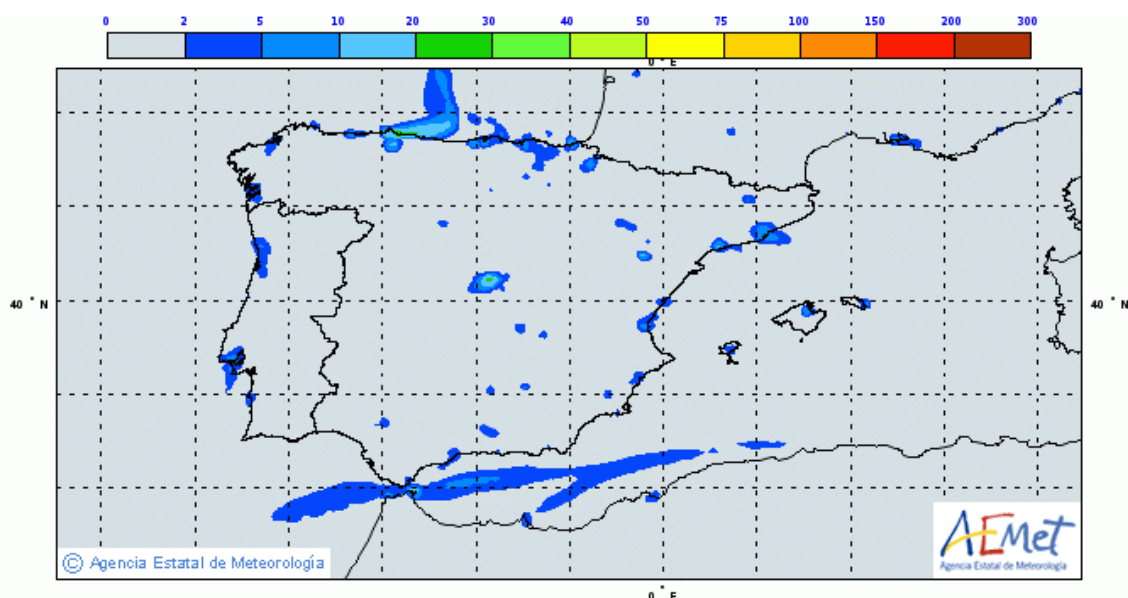


Fig. 5 – Concentraciones previstas en superficie de NO (µg/m<sup>3</sup>) generados por MOCAGE en el dominio Regional para el día 14 de agosto de 2019 a las 12 horas UTC.

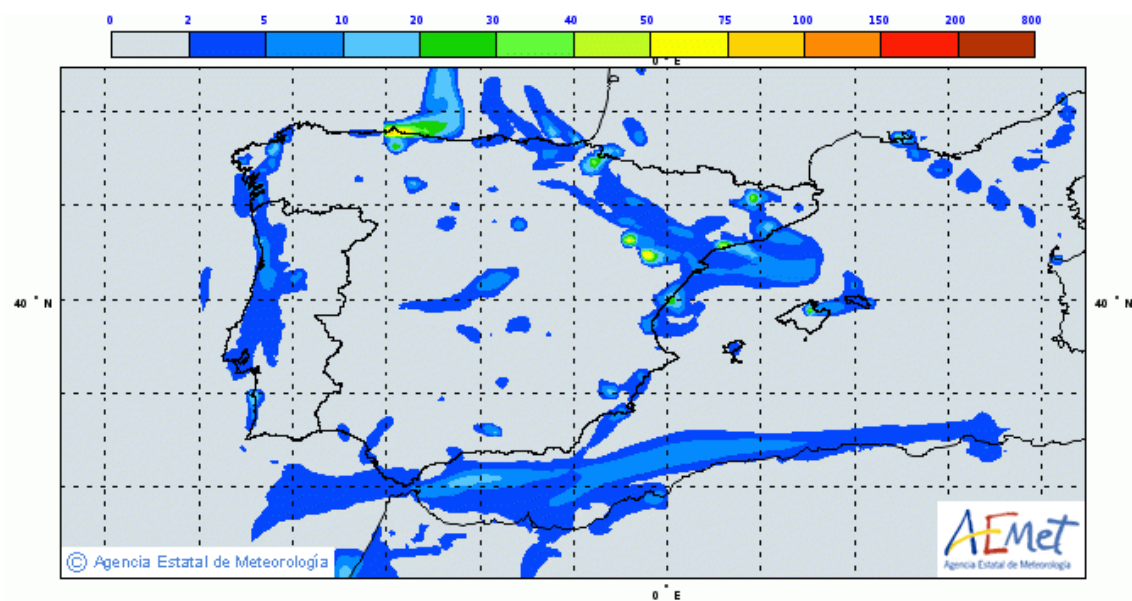


Fig. 6 – Concentraciones previstas en superficie de SO<sub>2</sub> (µg/m<sup>3</sup>) generados por MOCAGE en el dominio Regional para el día 14 de agosto de 2019 a las 12 horas UTC.

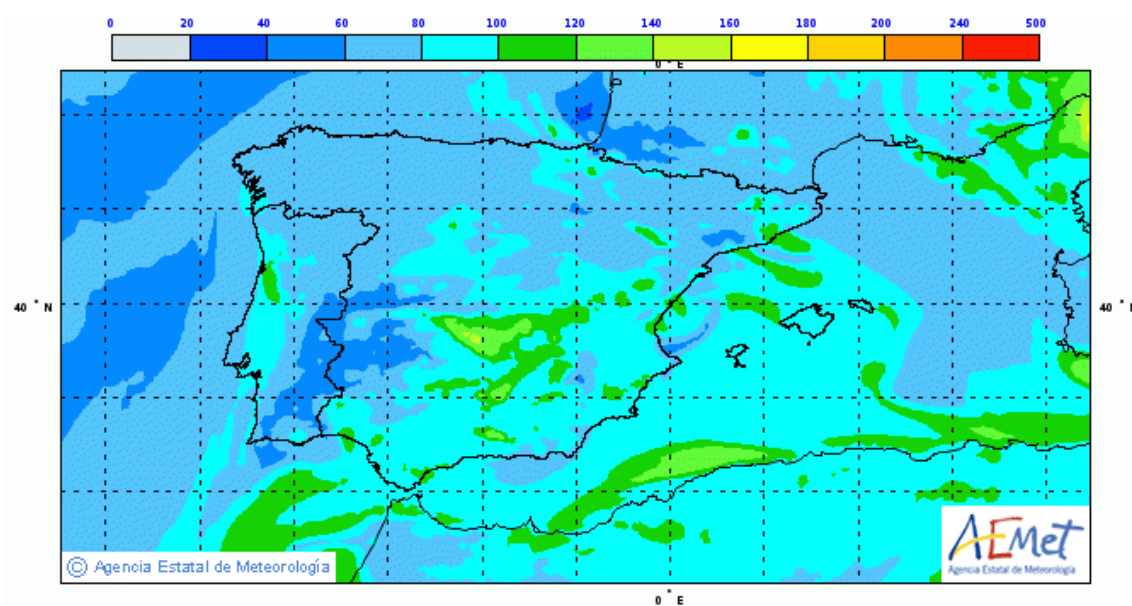


Fig. 7 – Concentraciones previstas en superficie de O<sub>3</sub> (µg/m<sup>3</sup>) generados por MOCAGE en el dominio Regional para el día 14 de agosto de 2019 a las 12 horas UTC.

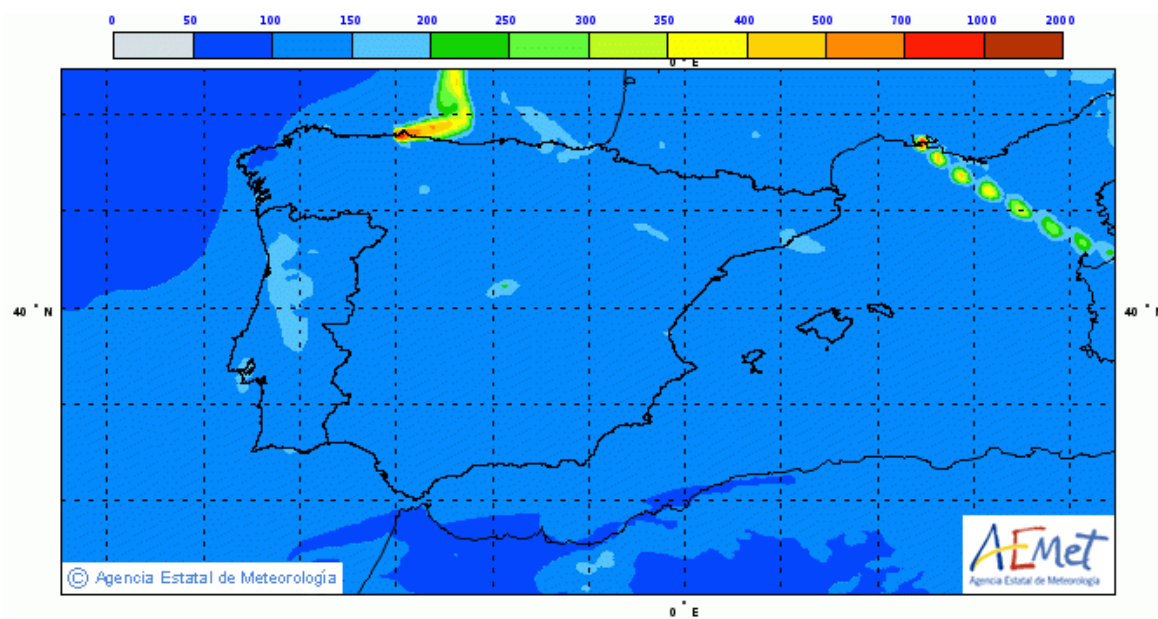


Fig. 8 – Concentraciones previstas en superficie de CO ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) generados por MOCAGE en el dominio Regional para el día 14 de agosto de 2019 a las 12 horas UTC.

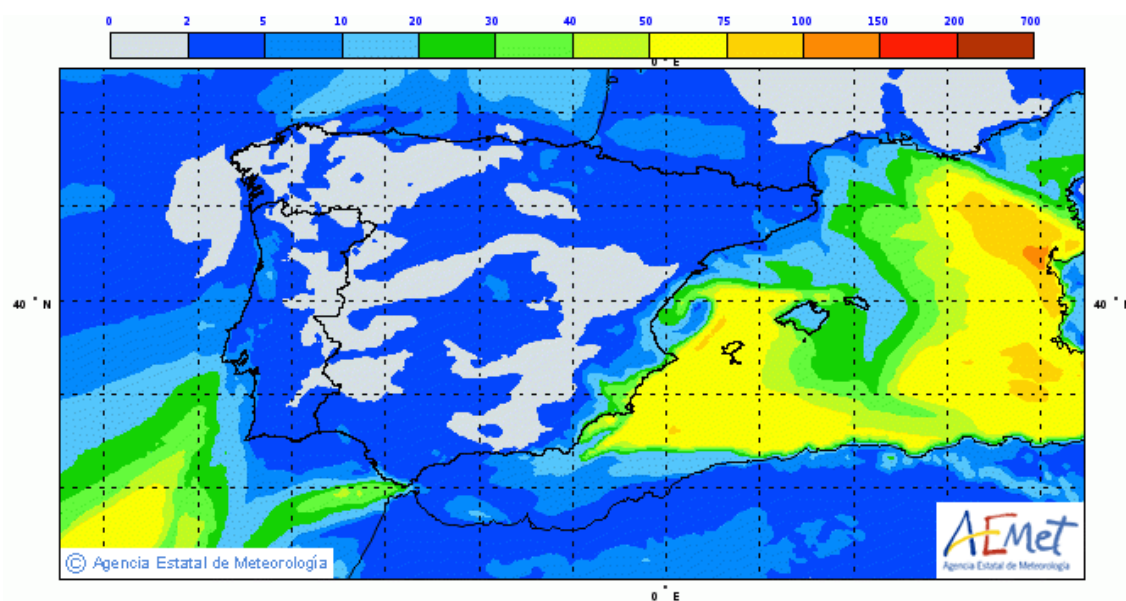


Fig. 9 – Concentraciones previstas en superficie de PM10 ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) generados por MOCAGE en el dominio Regional para el día 14 de agosto de 2019 a las 12 horas UTC.

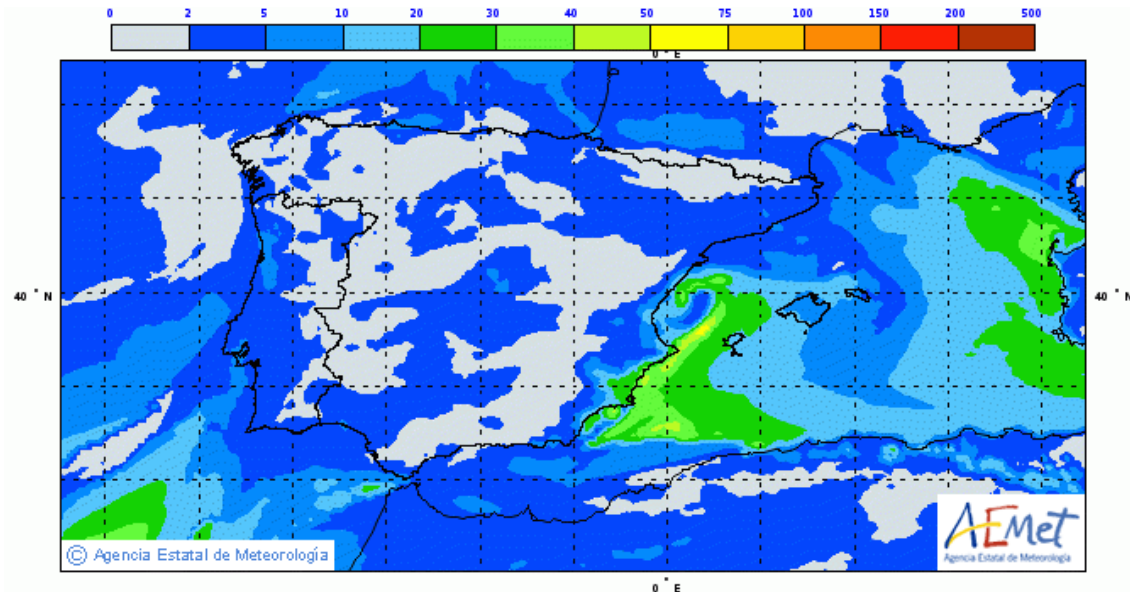


Fig. 10 – Concentraciones previstas en superficie de PM2.5 ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) generados por MOCAGE en el dominio Regional para el día 14 de agosto de 2019 a las 12 horas UTC.

### Información adicional

Para más información acerca del modelo MOCAGE, se pueden consultar los siguientes enlaces:

<http://atmosphere.copernicus.eu/documentation-regional-systems>

Para más información sobre el programa Copernicus Atmosphere se puede consultar:

<http://atmosphere.copernicus.eu/>

Para más información sobre el inventario de emisiones TNO-MACC-III se puede consultar el siguiente enlace:

<http://drdsi.jrc.ec.europa.eu/dataset/tno-macc-iii-european-anthropogenic-emissions>

### Referencias

Bechtold, P., E. Bazile, F. Guichard, P. Mascart and E. Richard, A mass flux convection scheme for regional and global models, *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 127, 869-886, 2001.

Giorgi, F. and W. L. Chameides, Rainout Lifetimes of Highly Soluble Aerosols and Gases as Inferred from Simulations With a General Circulation Model, *J. Geophys. Res.*, 91(D13), 367-376, 1986.



- Josse B., Simon P. and V.-H. Peuch, Rn-222 global simulations with the multiscale CTM MOCAGE, *Tellus*, 56B, 339-356, 2004.
- Kuenen, J.J.P., Visschedijk, A.J.H., Jozwicka, M., and Denier van der Gon, H.A.C., TNO-MACC\_II emission inventory; a multi-year (2003-2009) consistent high-resolution European emission inventory for air quality modelling. *Atmos. Chem. Phys.*, 14, 10963-10976, 2014. doi: 10.5194/acp-14-10963-2014
- Lefèvre, F., Brasseur, G. P., Folkins, I., Smith, A. K. and P. Simon, Chemistry of the 1991-1992 stratospheric winter: three-dimensional model simulations, *J. Geophys. Res.*, 99 (D4), 8183-8195, 2004.
- Louis J.F., A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere, *B. Layer Meteor.*, 17, 197-202, 1979.
- Marecal, V., Peuch, V.-H., Andersson, C., Andersson, C., Arteta, J., Beekmann, M., Benedictow, R., Bergström, R., Bessagnet, B., Cansado, A., Chéroux, F., Colette, A., Coman, A., Curier, R.L., Denier van der Gon, H.A., Drouin, A., Elbern, H., Emili, E., Engelen, R.J., Eskes, H.J., Foret, G., Friese, E., Gauss, M., Giannaros, C., Guth, J., Joly, M., Jaumouillé, E., Josse, B., Kadygrov, N., Kaiser, J.W., Krajsek, K., Kuenen, J., Kumar, U., Liora, N., Lopez, E., Malherbé, L., Martínez, I., Melas, D., Meleux, F., Menut, L., Moinat, P., Morales, T., Parmentier, J., Piacentini, A., Plu, M., Poupkou, A., Queguiner, S., Robertson, L., Rouïl, L., Schaap, M., Segers, A., Sofiev, M., Tarasson, L., Thomas, M., Timmermans, R., Valdebenito, Á., van Velthoven, P., van Verseendaal, R., Vira, J., and Ung, A., A regional air quality forecasting system over Europe: the MACC-II daily ensemble production, *Geosci. Model Dev.*, 8, 2777-2813, 2015. doi:10.5194/gmd-8-2777-2015
- Mari, C., Jacob, D. J. and Betchold, P., Transport and scavenging of soluble gases in a deep convective cloud, *J. Geophys. Res.*, 105, D17, 22, 255-267, 2000.
- Stockwell, W.R. et al., A new mechanism for regional atmospheric chemistry modelling, *J. Geophys. Res.*, 102, 25847-25879, 1997
- Williamson, D. L. and P. J. Rash, Two-dimensional semi-lagrangian transport with shape preserving interpolation, *Mon. Wea. Rev.*, 117, 102-129, 989.
- Wesely, M. L., Parameterization of surface resistance to gaseous dry deposition in regional numerical models, *Atmos. Env.*, 16, 1293-1304, 1989.