



Potenciando pronósticos ambientales en México: supercómputo como pilar en modelación de calidad del aire y de dispersión de cenizas

José Agustín García Reynoso

Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Ciencias de la Tierra y Cambio
Climático, Ciudad de México, México.
ORCID: 0000-0001-7718-9241

Recepción: 14 de enero de 2026

Aceptación: 21 de agosto 2026

Agosto 2026 • número de revista 17 • DOI: 10.22201/dgtic.26832968e.2026.17.127

Potenciando pronósticos ambientales en México: supercómputo como pilar en modelación de calidad del aire y de dispersión de cenizas

Resumen

La calidad del aire es el resultado de la interacción entre emisiones contaminantes y procesos meteorológicos. Para predecirla, es necesario resolver numéricamente las ecuaciones fundamentales que describen el comportamiento atmosférico, incluyendo conservación de masa, momento, energía y reacciones químicas. Estas simulaciones requieren gran capacidad de supercómputo.

En el Instituto de Ciencias de la Atmósfera y Cambio Climático (ICAYCC) de la UNAM, se utiliza el modelo WRF-Chem, que integra meteorología, transporte y química. Este modelo se ejecuta en un sistema de cómputo de alto rendimiento donde se utilizan 81 núcleos para el procesamiento en paralelo. El WRF-Chem utiliza un dominio único, dividido en 90x90 celdas de 3x3 km. Su ejecución requiere 90 minutos de procesamiento para 72 horas de pronóstico.

El modelo Fall3D se emplea para la dispersión y el depósito de ceniza volcánica. Efectúa 72 corridas que incluyen tres niveles de columna (3, 5 y 10 km) en 24 horas. Cada simulación usa 12 núcleos y emplea cerca de 5 minutos, completando todas las simulaciones en ~70 minutos.

Para soportar estas tareas, se utiliza el WRF-Chem, compilado para la infraestructura disponible. Su ejecución se realiza mediante scripts automatizados en Bash, que emplean el sistema de gestión de trabajos (SLURM) y de archivos paralelos (LUSTRE). Los productos generados se despliegan posteriormente en una página web.

Palabras Clave: ozono, Popocatépetl, aerosol, contaminante secundario, SLURM, LUSTRE.

Enhancing environmental forecasting in Mexico: Supercomputing as a pillar for air quality and ash dispersion modeling

Abstract

Air quality is the result of the interaction between pollutant emissions and meteorological processes. To predict it, it is necessary to numerically solve the fundamental equations that describe atmospheric behavior, including conservation of mass, momentum, energy, and chemical reactions. These simulations require significant supercomputing power.

At the ICAYCC of UNAM, the WRF-Chem model is used, which integrates meteorology, transport, and chemistry. This model runs on a high-performance computing system using 81 cores for parallel processing. WRF-Chem uses a single domain divided into 90x90 cells of 3x3 km. Its execution requires 90 minutes of processing for a 72-hour forecast.

The Fall3D model is used for volcanic ash dispersion and deposition. It performs 72 runs that include three column levels (3, 5, and 10 km) over 24 hours. Each simulation uses 12 cores and takes approximately 5 minutes, completing all simulations in ~70 minutes. To support these tasks, WRF-Chem compiled for the available infrastructure is used; automated Bash scripts are used for execution, employing a job management system (SLURM) and a parallel file management system (LUSTRE); the products are deployed on a web page.

Keywords: *ozone, Popocatépetl, aerosol, secondary pollutant, SLURM, LUSTRE.*

Introducción

Los fenómenos físicos que ocurren en la naturaleza pueden describirse mediante ecuaciones como la de conservación de masa, *momentum* y de cinética química.

Así, para comprender los desplazamientos del aire, vapor de agua y contaminantes en la atmósfera, se emplea la ecuación de conservación de masa [1], la cual es representada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

Donde

ρ - es la densidad del fluido (kg m^{-3})

t - es el tiempo (s)

$\mathbf{u} = (u, v, w)$ - vector de velocidad del fluido

Por otra parte, para estudiar y predecir el comportamiento del viento, se emplea la ecuación de conservación del momento lineal (ecuaciones de Navier-Stokes) [1]:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \text{Fricción}$$

ρ Densidad del fluido

$\mathbf{u}$ Vector velocidad

p Presión estática [Pa]

$\boldsymbol{\tau}$ Tensor de esfuerzos viscosos (τ_{ij})

t Tiempo (s)

$\mathbf{g}$ Vector aceleración gravitacional [m s^{-2}]

∇p Gradiente de presión

$\nabla \cdot (\rho uu)$ Divergencia del tensor de momento convectivo

Estas ecuaciones se emplean para estimar el estado actual y futuro de la atmósfera. En la predicción meteorológica, se manejan modelos eulerianos que resuelven estas ecuaciones mediante métodos numéricos, como en el modelo WRF [2]-[4].

Por otra parte, la calidad del aire en un sitio depende principalmente de las condiciones meteorológicas y de las emisiones. Por ello, también se emplean modelos para estimar las emisiones [5]-[7] y generar su distribución espacial, temporal y por especies químicas [8]. En el caso de contaminación por partículas, ocurren procesos de condensación, coagulación, absorción, sedimentación y depósito que se deben considerar para poder describir los niveles de concentración y el transporte de las emisiones. Para ello, se emplean modelos como el Fall3D [9], que incluye el término de sedimentación, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot [C(u + v_s)] = \nabla \cdot (K \nabla C) + S$$

Donde

$C(x, t)$ Concentración de partículas [kg, m^{-3}] o [m^{-3}] según el caso

u Velocidad del fluido [m, s^{-1}]

v_s Velocidad de sedimentación de partículas (generalmente vertical y dirigida hacia abajo)

s Tiempo [s]

K Tensor o coeficiente escalar de difusión turbulenta [$m^2 s^{-1}$]

S Términos fuente o sumidero (emisiones, deposición, reacciones)

$\nabla \cdot$ Divergencia

∇C Gradiente de concentración

Si se desea conocer el estado del tiempo o calidad del aire a partir de condiciones iniciales y de frontera para una región en particular, la resolución de las ecuaciones anteriores requiere de una gran capacidad de cálculo para obtener resultados en un tiempo razonable. Por ello, se requiere de sistemas de procesamiento numérico en paralelo, conocidos como equipos de supercómputo (HPCC).

Desarrollo

En el Instituto de Ciencias de la Atmósfera y Cambio Climático (ICAyCC), se cuenta con un sistema HPCC compuesto por 20 nodos, cada uno con 24 *cores* (Intel Xeon) a 2.3 GHz, que alcanza un rendimiento de 17.4 TFP. El sistema cuenta con Debian 5.10, compiladores Intel de 2019 y alrededor de 960 TB de almacenamiento en paralelo. El entorno de software posee 50 librerías científicas administradas con Lmod, versión 6.6 [10], mientras que la gestión de trabajos se administra con LSURM [11]. Esta capacidad de supercómputo permite generar las emisiones que se emplean en el pronóstico de calidad del aire [12], así como realizar la dispersión y depósito de cenizas [13] en un tiempo lo suficientemente corto (calidad del aire en 90 min y cenizas en 15 min) para generar pronósticos diarios y publicar los resultados en la web. En contraste, la ejecución de estos pronósticos en un sistema con un procesador de 2.3 GHz, incluso considerando una escalabilidad óptima, implicaría tiempos de procesamiento aproximados de cinco días para el modelo de calidad del aire y alrededor de tres días para el modelo de dispersión de cenizas. Estos tiempos resultan poco viables para su aplicación operativa en tiempo real. Para el caso de dispersión de cenizas, se realizó un trabajo previo para implementar una estrategia de ejecución del modelo Fall3D, en donde se optimiza el uso del recurso computacional mediante la asignación eficiente del número óptimo de núcleos [14]. Con base en ese trabajo, se identificó que se requieren 12 núcleos para este equipo. Mediante el empleo de Crontab, se programa la ejecución del script principal en Bash, el cual llama a los diversos scripts encargados de realizar los diferentes procesos necesarios para la generación de los pronósticos. Los pasos a seguir son el procesamiento de datos meteorológicos de modelos globales (WPS,REAL), la generación de emisiones de los compuestos contaminantes en la región (DiETE) [8] y la ejecución del modelo de calidad del aire (WRF/chem) [15]. Para el caso de la dispersión de cenizas, el modelo Fall3D [16] requiere de los programas auxiliares que realizan el procesamiento de la

información de meteorología (SetDBS), la distribución de tamaños (SetTGSD) y la emisión de cenizas (SetSrc). Una vez ejecutados los pronósticos, se utilizan scripts para almacenar los resultados, generar las imágenes que serán publicadas y, finalmente, transferirlas del clúster al equipo donde está el sitio web. Una descripción del sistema de pronóstico de calidad del aire se puede encontrar en [12], mientras que la correspondiente al sistema de dispersión de cenizas volcánicas en [14]. En la Fig. 1, se puede apreciar el diagrama de flujo del proceso de elaboración de los pronósticos descritos anteriormente, donde se incluye el uso de los pronósticos del depósito de ceniza para la elaboración de mapas de peligro (HazardMaps) [17].

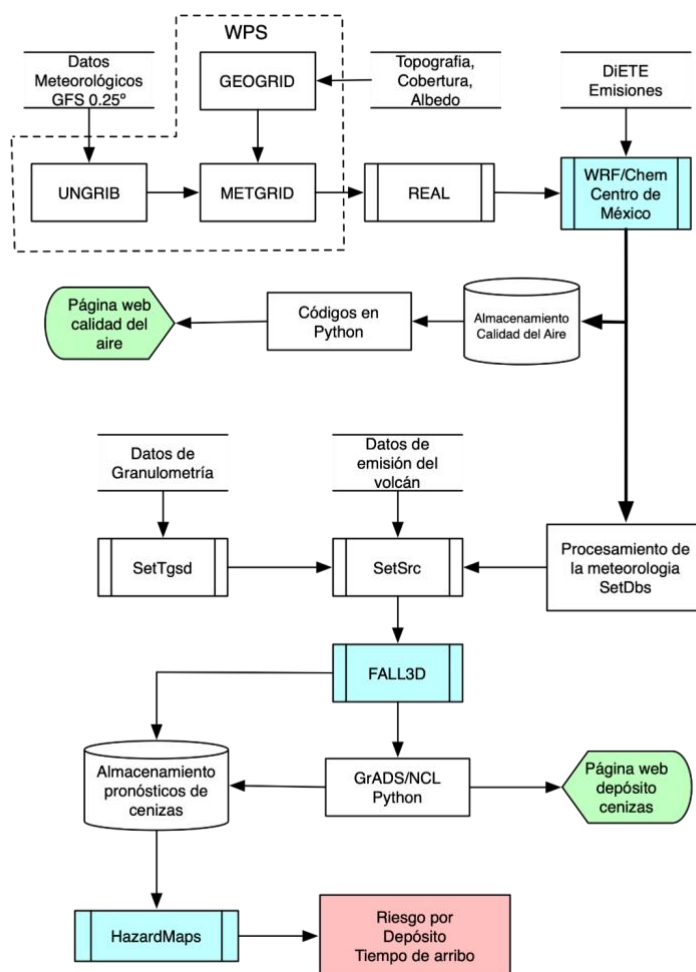


Fig. 1. Esquema del proceso de pronóstico de calidad del aire (WRF/Chem) y su acoplamiento con el pronóstico de dispersión de cenizas (Fall3D).

Resultados

Una vez que han terminado los procesos de generación de los pronósticos, los resultados de estos se pueden observar en la página web <https://lamca.atmosfera.unam.mx>. En este sitio, se presentan las imágenes del pronóstico de calidad del aire y del de dispersión de cenizas. En el caso de calidad del aire, se tienen imágenes horarias de tres días para los contaminantes monóxido de carbono (CO), partículas menores de 10 micras (PM₁₀), ozono, dióxido de nitrógeno (NO₂) y dióxido de azufre (SO₂). Un ejemplo de los productos obtenidos se presenta en la Fig. 2, la cual muestra la distribución espacial de la concentración de ozono para las 14 horas.

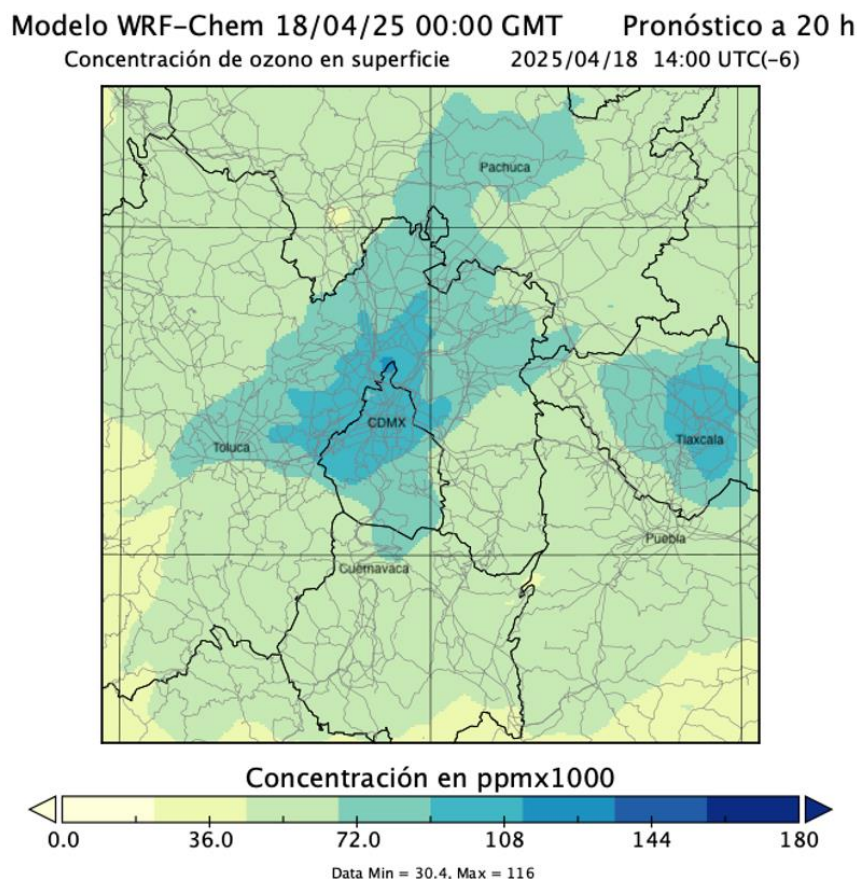


Fig. 2. Distribución superficial de ozono en el Centro de México a las 14:00 locales.

En el caso del pronóstico de dispersión de cenizas, a partir de erupciones hipotéticas, se obtienen productos que muestran el depósito de ceniza, las concentraciones ambientales a diferentes niveles de vuelo y otros productos de interés como cortes de norte a sur (lat) y de oeste a este (long).

En la Fig. 3, se muestra el panel de concentraciones a los diferentes niveles de vuelo, el nivel de vuelo de FL100 corresponde a 10 000 pies de altitud.

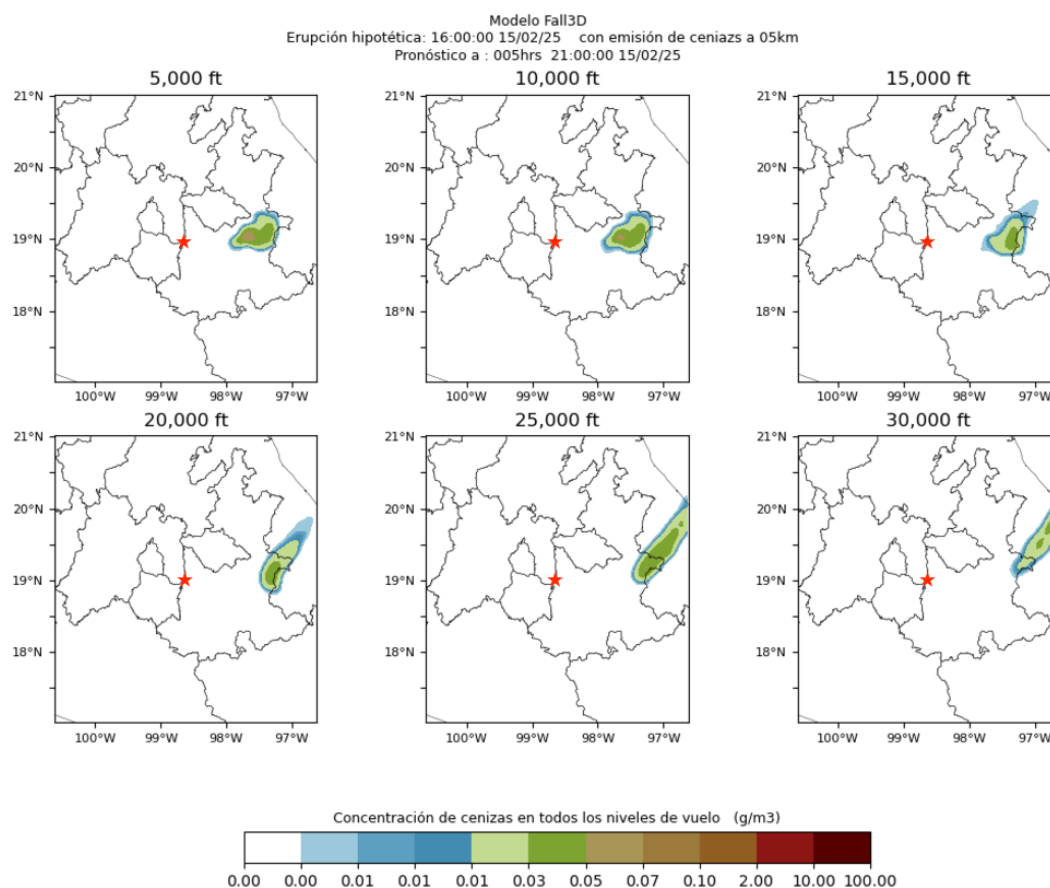


Fig. 3. Panel de concentración de ceniza a diferentes niveles de vuelo, la estrella indica la ubicación del cráter del Popocatepetl.

El sistema de pronóstico de calidad del aire se ha evaluado para conocer su desempeño [18]. Los resultados de las simulaciones del depósito de ceniza se han empleado mediante el código HazarMaps [19] para generar mapas donde se presentan las zonas con la probabilidad de depósito de ceniza y tiempo de arribo [20].

Conclusión

Los procesos atmosféricos se pueden describir con ecuaciones matemáticas. Para resolver estas ecuaciones y conocer las condiciones actuales y futuras de la atmósfera, se necesita una capacidad considerable de cálculo numérico; debido a esto, el uso de herramientas de alto desempeño es una necesidad más que una opción. La transformación de los resultados de estas ecuaciones complejas en imágenes comprensibles contribuye al acceso público de la ciencia y la protección civil. La automatización de los procesos mediante *Crontab* y *scripts* en Bash para la ejecución de los modelos garantiza la generación diaria de los pronósticos. El uso de middleware como SLURM y Lmod demuestra la especialización técnica en el manejo de Tecnologías de la Información y Comunicación (TIC) aplicadas en las ciencias atmosféricas. Así, con HPCC y la automatización, se facilita la generación de pronósticos en tiempos razonables, lo que permite una toma de decisiones más efectiva tanto de las autoridades como de la sociedad.

Agradecimientos

Se reconce y agradece al Lic. Pedro Damián Cruz Santiago quien administra el equipo de supercómputo donde se realizan los pronósticos, a la Mtra. Dulce Rosario Herrera Moro quien mantiene las páginas web y a la unidad de cómputo y supercómputo del Instituto de Ciencias de la Atmósfera.

Sobre el uso de herramientas de Inteligencia Artificial Generativa:

Se empleó ChatGpt version 1.2025.330 para generar el código de Latex de las ecuaciones y términos de las mismas.

Referencias

- [1] J. M. Wallace and P. V. Hobbs, *Atmospheric science: an introductory survey*, 2nd ed. Amsterdam, Netherlands: Elsevier Academic Press, 2006, p. 483.
- [2] W. C. Skamarock *et al.*, *A Description of the Advanced Research WRF Model Version 4.3* Boulder, CO, USA: National Center for Atmospheric Research, 2021, ed, 2022.

- [3] W. C. Skamarock *et al.*, *A description of the Advanced Research WRF version 3*. Boulder, CO, USA: National Center for Atmospheric Research , 2008.
- [4] W. C. Skamarock *et al.*, *A description of the advanced research WRF model version 4*, Boulder, CO, USA: National Center for Atmospheric Research, p. 145, 2019.
- [5] U.S. Environmental Protection Agency, *Compilation of Air Pollutant Emissions Factors 1.1 Bituminous And Subbituminous Coal Combustion*, Environmental Protection Agency, US, AP-42, April, 1998 1998, vol. 1. [Online]. Available: <https://www.epa.gov/air-emissions-factors-and-quantification/ap-42-fifth-edition-volume-i-chapter-1-external-0>
- [6] Dirección General de Gestión de la Calidad del Aire, *Inventario de emisiones de la Ciudad de México 2016*, 1 ed. (no. 1). Ciudad de México: Secretaria del Medio Ambiente, 2018, p. 220.
- [7] Dirección General de Gestión de la Calidad del Aire, *Inventario de emisiones de la Zona Metropolitana del Valle de México 2018*, Ciudad de México, México: Gobierno de la Ciudad de México, 2021, p. 168. [Online]. Available: <http://www.aire.cdmx.gob.mx/descargas/publicaciones/flippingbook/inventario-emisiones-cdmx-2018/Inventario-de-emisiones-cdmx-2018.pdf>. Accessed on: 25/nov/2021.
- [8] J. A. García-Reynoso, B. E. Mar-Morales, and L. G. Ruiz-Suárez, "Spatial, temporal and speciation model of the Mexico national emissions inventory (base year 2008) for its use in air quality modeling (DiETE)," *Revista Internacional de Contaminacion Ambiental*, Article vol. 34, no. 4, pp. 635-649, 2018, doi: 10.20937/RICA.2018.34.04.07.
- [9] A. Folch, A. Costa, and G. Macedonio, "FALL3D: A computational model for transport and deposition of volcanic ash," *Computers and Geosciences*, vol. 35, no. 6, pp. 1334-1342, 2009, doi: 10.1016/j.cageo.2008.08.008.
- [10] *A New Environment Module System — Lmod 6.6 Documentation*. (2020). Texas Advanced Computing Center. [Online]. Available: <https://lmod.readthedocs.io/en/6.6/>

- [11] A. B. Yoo, M. A. Jette, and M. Grondona, "SLURM: Simple Linux Utility for Resource Management," in *Job Scheduling Strategies for Parallel Processing*, Berlin, Heidelberg, D. Feitelson, L. Rudolph, and U. Schwiegelshohn, Eds., 2003// 2003: Springer Berlin Heidelberg, pp. 44-60.
- [12] A. R. Garcia, B. E. Mar-Morales, and L. G. Ruiz-Suárez. *Numerical air quality forecast modeling system: Mexico case study*, pp. 195-202, 2016.
- [13] A. García-Reynoso, J. Zavala-Hidalgo, H. Delgado-Granados, and D. R. Herrera-Moro, "The Use of HPC on Volcanic Tephra Dispersion Operational Forecast System," in *Communications in Computer and Information Science*, vol. 948. Cham, Switzerland: Springer, 2019, pp. 110-117, doi: 10.1007/978-3-030-10448-1_10.
- [14] A. R. García, J. Zavala-Hidalgo, H. Delgado-Granados, J. Garcia-Escalante, O. Gómez-Ramos, and D. Herrera-Moro, "An automated ash dispersion forecast system: case study Popocatepetl volcano, Mexico," *Journal of Applied Volcanology*, vol. 12, no. 1, Art no. 9, 2023, doi: 10.1186/s13617-023-00135-4.
- [15] G. A. Grell *et al.*, "Fully coupled 'online' chemistry within the WRF model," *Atmospheric Environment*, vol. 39, no. 37, pp. 6957-6975, 2005, doi: 10.1016/j.atmosenv.2005.04.027.
- [16] A. Folch, A. Costa, and G. Macedonio, *FALL3D-7.1 User's Manual*, Barcelona, Spain: Barcelona Supercomputing Center (Bsc-CNS), 2016, p. 45. [Online]. Available: https://thehub.org/resources/3950/download/fall3d_7.1.pdf. Accessed on: 26/07/2023.
- [17] A. Folch, *HazardMaps*, Fortran code, HazardMaps.f90, 2016.
- [18] J. A. Rodríguez-Zas and J. A. García-Reynoso, "Updating of the 2013 national emissions inventory for air quality modeling in central Mexico," *Revista Internacional de Contaminacion Ambiental*, vol. 37, pp. 463-487, 2021, doi: 10.20937/RICA.53865.
- [19] R. Bonasia *et al.*, "Long-range hazard assessment of volcanic ash dispersal for a Plinian eruptive scenario at Popocatepetl volcano (Mexico): implications for civil

aviation safety," *Bulletin of Volcanology*, vol. 76, no. 1, p. 789, 2014, doi: 10.1007/s00445-013-0789-z.

- [20] J. A. García Reynoso and B. E. Mar-Morales, "Spatial analysis of volcanic ash dispersion from Popocatépetl: probability estimation and influence area mapping in a risk context," *Terra digitalis*, vol. 9, no. 1, pp. 1-6, 2025, doi: 10.22201/igg.25940694e.2025.1.125.