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

UNIVERSITAT DE BARCELONA

9. Conclusions i línies de treball de futur

En aquest capítol es presenten les principals conclusions que es poden extreure de la recerca fonamental realitzada pel doctorand, així com les futures directrius a seguir per tal de continuar desenvolupant aquesta línia de recerca.

9.1. Conclusions

Com s'ha comentat en el primer capítol d'aquest document l'objectiu fonamental d'aquesta tesi doctoral era assolir la implementació d'un sistema de modelització que fos actual, àgil i efectiu. El sistema s'havia d'executar durant llargs períodes de temps sobre un àrea d'interès, a fi de poder-lo avaluar i analitzar les seves incerteses, sent la meta final arribar a desenvolupar un sistema de previsió operatiu. Per aquest motiu i per tal de millorar la previsió, ha calgut aplicar tot un seguit de correccions, que per altre part és una tècnica habitualment utilitzada en els sistemes de previsió meteorològica. En aquest camí s'han anat superant metes i etapes, corresponents a cada capítol d'aquest document, cadascuna de les quals ha pogut aportar diferents conclusions:

1. La creació i desenvolupament d'un sistema de modelització i previsió de la qualitat de l'aire Eulerià ha requerit de l'acoblament de tres tipus de models diferents: un model meteorològic, un model d'emissions i un model fotoquímic, sent el d'emissions un dels fonamentals. Respecte d'aquest últim, la seva creació i desenvolupament ha implicat el tractament d'una gran quantitat d'informació i esforç inicial. Les contribucions més importants del doctorand al model d'emissió MNEQA han mostrat que:

    - La incorporació del mòdul d'aerosols esdevé decisiva per al pronòstic de la qualitat de l'aire tant pel que fa gasos com a partícules.
    - La incorporació d'una metodologia d'estimació de les emissions degudes al trànsit produït dins de les àrees urbanes ha permès augmentar la bondat dels pronòstics. Pel que fa a l'ozó, ha augmentat en un 7% el IOA corresponent als màxims 1-h d'ozó; en un 19% el IOA dels màxims 1-h de diòxid de nitrogen pronosticat; i en un 6% el IOA corresponent al valor diari de PM10 (comparant escenaris amb i sense aquesta incorporació en un episodi determinat sobre l'àrea de Catalunya).
    - La incorporació del inventari d'emissions industrials de la Generalitat de Catalunya a MNEQA va suposar una millora considerable en els pronòstics de la qualitat de l'aire. Tot i així, s'han observat incerteses: degut a valors d'emissió no realistes presents en aquest inventari, així s'han observat diferències de fins a dos ordres de magnitud en la intensitat d'emissió depenent de la data de declaració utilitzada. Es constata que aquest inventari requereix d'una actualització i revisió contínua.
    - La incorporació d'una metodologia que doni resposta a la necessitat d'un tractament específic de les emissions en alçada ha permès ajustar més correctament les previsions, i eliminar la sobreestimació excessiva de les concentracions de contaminants primaris a prop de focus industrials importants.

- L'acoblament de la metodologia *top-down* de càlcul de les emissions a la metodologia *bottom-up* seguida en la primera versió de MNEQA, ha permès augmentar la bondat dels pronòstics: ha augmentat en un 11% el IOA corresponent als màxims 1-h d'ozó; en un 27% el IOA dels màxims 1-h de diòxid de nitrogen pronosticat; i en un 26% el IOA corresponent al valor diari de PM10. A més, ha permès la possibilitat d'utilitzar MNEQA a qualsevol punt d'Europa a partir de les dades del inventari EMEP.
- La incorporació de la pols per erosió i resuspensió ha permès millorar de forma considerable les previsions de PM10 a Catalunya, reduint l'error entre un 20 i un 30%, i augmentant els valors de PM10 pronosticats especialment a àrees del territori allunyades de focus industrials o de trànsit intens.

2. L' extracció i representació dels resultats donats pel sistema de modelització és una eina fonamental per conèixer, analitzar i visualitzar la qualitat de l'aire, així com per prendre les mesures correctores que siguin necessàries. Per aquest motiu s'ha creat un sistema de postprocessat que creiem que compleix totes les condicions anteriors, ja que els algoritmes acoblats generen mapes dels nivells de concentració dels principals contaminants, i mapes d'avisos per àrees geogràfiques determinades. Ambdós faciliten la visualització i la interpretació del pronòstic de la qualitat de l'aire.

3. La determinació de la incertesa en els sistemes de modelització acoblats requereix de l'avaluació de la incertesa de cadascun dels sistemes que el composen. Una forma d'avaluar aquesta incertesa és a partir del càlcul d'una sèrie de paràmetres estadístics. D'aquesta manera:

a) Els resultats de l'avaluació del model meteorològic ha mostrat que:

- S'ha assolit una millora dels pronòstics meteorològics a l'augmentar la resolució horitzontal, especialment en el cas de la temperatura i la direcció del vent.
- Les previsions d'humitat específica, velocitat del vent i temperatura avaluades durant dos períodes d'estiu sobre l'àrea de Catalunya reflecteixen un bon ajust envers les recomanacions establertes, tot i així s'observa que:

  - En el cas de la temperatura el model MM5 subestima el seu valor, sobretot en el casos en que la temperatura enregistrada es superior als 30ºC.
  - La direcció del vent pronosticada presenta desviacions (MAGE de 70º) envers les mesures, associades en gran part a la topografia complexa de l'àrea d'aplicació.
  - En general, els resultats de l'avaluació meteorològica estan en concordança amb d'altres avaluacions del model MM5 quan s'utilitza per aplicacions de la qualitat de l'aire.

b) Els resultats de la validació del model d'emissions i fotoquímic ja que la seva avaluació s'ha de fer de forma conjunta mostren:

- Una subestimació diürna dels valors horaris de la concentració d'ozó deguda possiblement a diversos factors entre els que destaquem: la dificultat de reproduir circulacions a microescala que són molt inferiors a la grandària de la

malla utilitzada; la tendència a la subestimació de les emissions de precursors d'ozó, bàsicament deguda a la incertesa en les emissions de MNEQA,; a la distribució temporal d'aquestes; i també a la subestimació dels pronòstics de temperatura del model meteorològic.

- Una sobreestimació nocturna dels valors horaris d'ozó degut a diferents causes que és citen a continuació: el model pot no representar de forma acurada els processos fisicoquímics nocturns; la incertesa en les emissions nocturnes donades pel model MNEQA; desviacions en el pronòstic d'algunes variables meteorològiques quan el forçament sinòptic és dèbil.
- Existeixen però desviacions model-mesura que no són pròpies del sistema de modelització en si mateix, si no que són fruit de que els punts de mesurament utilitzats en la validació estadística no són representatius de la zona on han estan ubicats i que possiblement caldria re-ubicar
- El sistema reprodueix dins dels límits recomanats per la EPA els valors màxims 1-h i 8-h de les concentracions de l'ozó troposfèric.
- El sistema presenta valors d'incertesa envers de la modelització de la concentració d'ozó dins dels límits establerts per la Directiva Europea perquè el sistema pugui ser utilitzat de forma operativa.
- L'error sistemàtic del sistema és major que la contribució aleatòria i, per tant, el sistema admet processos de millora i refinament.
- S'observen desviacions en els pronòstics de la concentració de diòxid de nitrogen que poden ser principalment deguts al desconeixement dels perfils horaris de determinades emissions.
- S'observen desviacions en el pronòstic de les concentracions de PM10 que requeririen d'un anàlisi dels resultats donats pel sistema durant altres períodes de l'any per tal d'identificar altres possibles fonts d'error.

4. Les incerteses del sistema de modelització de la qualitat de l'aire fan necessària l'aplicació d'una metodologia de correcció de la desviació entre el model i la mesura per tal de millorar els pronòstics operatius. L'aplicació de diferents tècniques comporten una reducció considerable dels errors estadístics envers els calculats sense l'aplicació d'aquestes. En situacions de persistència i en general, la millor tècnica s'ha demostrat que és la *mean subtraction*.

5. S'ha implementat en el sistema de qualitat de l'aire el model meteorològic WRF. Aquest fet ha permès avaluar la sensibilitat de les previsions meteorològiques i de concentració de l'ozó troposfèric envers a la utilització de diferents esquemes de capa límit i de capa superficial. Els resultats de la comparació respecte als pronosticats pel model MM5 han mostrat l'existència de diferències apreciables en els valors de les variables meteorològiques, fet que ha provocat variacions considerables en la emissió i en la concentració d'ozó. Per la seva importància destaquem: la temperatura; la velocitat del vent; el patró de circulació; la humitat; la coberta nuvolosa; la emissió de precursors d'ozó; la velocitat de deposició seca; i l'alçada de la capa de mescla.

Finalment i gràcies a tot aquest treball, s'ha assolit l'objectiu fonamental i inicial d'aquest treball de recerca, i actualment el sistema de modelització i previsió de la qualitat de l'aire resta operatiu i els seus resultats es difonen de forma oberta a la web del grup de Recerca i Modelització Atmosfèrica a nivell Meso i Microscalar, MAiR, www.ub.edu/mair.

9.2. Línies de treball de futur

La modelització de la qualitat de l'aire és un àmbit de recerca científica que actualment està totalment obert i en contínua expansió. Per aquest motiu el doctorand contempla diverses línies de treball de futur que s'han de seguir per mantenir, millorar i actualitzar el sistema de modelització i previsió de la qualitat de l'aire:

- Continuar els pronòstics operatius amb el sistema de modelització de la qualitat de l'aire implementat per als principals contaminants atmosfèrics.

- Actualitzar de forma sistemàtica el model d'emissió MNEQA degut a canvis en la legislació i/o en la política mediambiental dels diferents governs.

- Utilitzar la validació estadística de les previsions com a eina per a la identificació d'incerteses i avaluació de millores sobre el sistema.

- Aplicar les eines de correcció de la desviació entre els resultats del model i les mesures a les previsions d'altres contaminants atmosfèrics.

- Ampliar l'estudi dels episodis amb alts nivells de concentració de contaminants a d'altres períodes de l'any diferent de l'estiu, per tal d'avaluar la incidència de diferents condicions meteorològiques sobre el sistema. Actualment el doctorand ja està desenvolupant aquest línia de treball.

- Incorporar nous models al sistema de modelització de la qualitat de l'aire, seguint el procés d'implementació que en aquesta tesi es presenta. En aquest sentit, els models acoblats de forma *on-line*, tipus WRF-Chem (Grell et al., 2005), on la relació entre la meteorologia i la fotoquímica es directa i bidireccional, formen l'estat més actual en aquest àmbit de la recerca. Actualment el doctorand ha integrat el model WRF-Chem al sistema AQM.cat, i està en fase d'estudi els resultats que proporciona.

Alhora de treballar en totes i cadascuna de les línies de futur comentades, convindria seguir apropant aquest sistema de modelització a les administracions competents per poder posar en pràctica totes les utilitats de la modelització que la Directiva Europea actual contempla. En aquesta línea, és necessari apropar i transferir responsablement aquest tipus de coneixement i tecnologia a la societat en general i en particular, en forma d'acords i col·laboracions a empreses i administracions diverses. Per estudis d'impacte ambiental, i en l'aplicació i avaluació de polítiques de control de la contaminació atmosfèrica, la utilització de sistemes de modelització com el presentat en aquest document és fonamental.