

Simulació numèrica mesoscalar de l'ozó troposfèric a Catalunya

Sara Ortega Jiménez

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.tesisenxarxa.net) 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.tesisenred.net) 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.tesisenxarxa.net) 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.

**SIMULACIÓ NUMÈRICA MESOSCALAR DE
L'OZÓ TROPOSFÈRIC A CATALUNYA**

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

**Tesi doctoral
Sara Ortega Jiménez
Maig 2009**

Programa de Doctorat d'Astronomia i Meteorologia

Bienni 2001-2003

Memòria presentada per Sara Ortega Jiménez per optar
al grau de Doctora en Ciències Físiques.

Directores de la tesi: M^a Rosa Soler Duffour
Marta Alarcón Jordan

Agraïments

Aquesta tesi doctoral ha de donar les gràcies a una sèrie de persones que han confiat en la seva autora o senzillament li han donat ànims per continuar endavant.

En primer lloc a les dues directores de tesi, la Dra. M^a Rosa Soler Duffour i a la Dra. Marta Alarcón Jordan. Si no hagués estat per elles ara no em trobaria en aquest punt. D'elles he après entre altres coses que el món científic es regeix de constància i dedicació, però sobretot d'entusiasme.

A la gent del Departament d'Astronomia i Meteorologia, i en especial al dam-nyam, un mini-nucli de gent molt especial amb qui he compartit moments inoblidables, han passat moltes persones per ell, i no vull fer una llista amb totes elles, però sí que vull donar les gràcies pels bons moments, tampoc hagués arribat a aquest punt sense ells. També a totes les persones que han passat pel grup de Micrometeorologia, on sempre hi ha hagut un ambient cordial i de companyerisme.

Al Dr. David Pino per la col·laboració amb les simulacions meteorològiques i la bona predisposició que sempre ha mostrat per ajudar-me. A la Dra. Cecília Soriano amb qui vaig participar en el primer projecte que va ser la base per aquesta tesi.

També vull mencionar el suport del Departament de Medi Ambient i Habitatge (DMAH) de la Generalitat de Catalunya en la cessió de les dades de les estacions automàtiques. I al Servei Meteorològic de Catalunya per les dades meteorològiques.

Sense els projectes ente el DAM i el DMAH no s'hagués pogut realitzar aquest treball, gràcies a les persones que els van fer possibles: projectes d'investigació 301126, 302141, 302937 i 303384.

Gràcies al Departament de Física i Enginyeria Nuclear de la UPC, en especial a la secció de Vilanova i la Geltrú, per donar-me la possibilitat de fer recerca i acabar la tesi aquests darrers anys.

Projecte CICYT: “Simulación numérica de la dispersión fotoquímica a nivel mesoscalar. Análisis de las diferentes alternativas y evaluación.”

Projecte CICYT: “Análisis y modelización de los flujos de momento, calor, gases de efecto invernadero y oxidantes fotoquímicos a nivel micro y mesoscalar. TRANSCLA parte II.”

Per acabar i no per això són menys importants, als meus pares i germans. I al Jordi, la meva parella, per donar-me sempre suport al llarg d'aquests anys.

Índex

Prefaci	1
1. Introducció	
1.1. L'ozó a l'atmosfera	3
1.2. L'ozó troposfèric a Catalunya	4
1.3. Efectes en els éssers vius	6
1.4. L'ozó i l'escalfament global	7
1.5. La química de l'ozó troposfèric	8
1.5.1 Fotoquímica	9
1.5.2 El cicle de l'ozó	10
1.5.3 La química de l'ozó troposfèric de fase gasosa	11
1.6. La deposició de l'ozó	14
2. Models de qualitat de l'aire	
2.1. Introducció	17
2.2. Classificació dels models	17
2.3. Models de qualitat de l'aire mesoscalars	19
2.4. Model operatiu	21
2.5. Models off-line i on-line	21
2.6. Resolució temporal	22
2.7. AQM i dominis d'aplicació	22
3. Model d'emissions	
3.1. Introducció.....	25
3.1.1. Inventari d'emissions vers model d'emissions	26
3.1.2. Necessitat d'un model d'emissions per Catalunya: MNEQA.....	26
3.2. MNEQA.....	27
3.3. Adaptació de les emissions EMEP al domini exterior.....	29
3.4. MNEQA en els dominis Catalans.....	31
3.5. Emissions biogèniques.....	32
3.5.1. Factors d'emissió estàndard.....	32
3.6. Emissions industrials a Catalunya.....	41
3.6.1. Plantes incineradores de residus.....	42
3.6.2. Cimenteres.....	44
3.6.3. Centrals tèrmiques.....	45
3.6.4. Centrals de cicle combinat.....	46
3.6.5. Cogeneració.....	47
3.6.6. Especiació del sector industrial i la producció d'energètica.....	51
3.7. Emissions del trànsit a Catalunya.....	52
3.7.1. Factors d'emissió en valor mig per vehicles lleugers.....	53
3.7.2. Factors d'emissió en valor mig per vehicles pesants.....	57
3.7.3. Càlcul del factor d'especiació en els VOCs.....	59
3.7.4. Perfils horaris de les intensitats del trànsit.....	61
3.7.5. Carreteres principals i carreteres secundàries.....	62
3.7.6. Incorporació de les emissions evaporatives en el model d'emissions MNEQA.....	63
3.7.7. Emissions causades per la variació diürna de la temperatura.....	65
3.7.8. Emissions causades per l'apagat del motor.....	66
3.7.9. Emissions evaporades en el trànsit de vehicles.....	66
3.7.10. Emissions del trànsit en ciutat.....	66

3.7.11. Emissions del trànsit a Barcelona.....	66
3.8. Emissions per l'ús de dissolvents.....	66
3.9. Altres fonts mòbils i maquinària.....	67
3.10. Futur del model d'emissions.....	67
4. MNEQA: estructura del programa i resultats.	
4.1. Introducció.....	69
4.2. Estructura modular.....	71
4.3. Comparació amb altres models d'emissions.....	72
4.4. Resultats dels casos d'estudi.....	74
4.5. Incertesa en les emissions.....	88
5. Model meteorològic	
5.1. Descripció.....	91
5.2. Característiques de la simulació meteorològica	94
5.3. Estudi de les situacions meteorològiques.....	95
5.3.1. Simulació del 10 al 14 de juny del 2003.....	95
5.3.2. Simulació del 1 al 6 de juliol del 2003.....	100
5.3.3. Simulació del 1 al 10 d'agost de 2003.....	103
5.4. Entrada de la brisa marina.....	106
5.5. Validació de la simulació meteorològica	112
6. Mòdul fotoquímic amb CMAQ	
6.1. Models de transport fotoquímics.....	121
6.2. Problema de clausura.....	122
6.3. Mecanisme químic.....	123
6.4. Resolució del sistema d'equacions.....	123
6.5. Posada en escena de CMAQ.....	123
6.5.1. Descripció de CMAQ.....	123
6.5.2. Períodes simulats.....	125
6.6. Validació	129
6.6.1. Validació qualitativa.....	129
6.6.2. Validació estadística.....	156
7. Conclusions i futur	
7.1. Conclusions del model d'emissions.....	161
7.2. Conclusions del model de qualitat de l'aire.....	162
7.3. Continuació de la línia de recerca.....	163
8. Bibliografia.....	165
Apèndix 1. Unitats.....	169
Apèndix 2. Cogeneració.....	171
Apèndix 3. Vehicles lleugers.....	177
Apèndix 4. Vehicles pesants.....	183
Apèndix 5. Classificació de les carreteres	191
Apèndix 6. Arxius del programa MNEQA.....	209
Apèndix 7. Emissions per dia.....	215
Apèndix 8. Estadístics	219
Apèndix 9. Publicacions.....	221

PREFACI

Aquesta tesi és fruit de la necessitat de modelitzar l'ozó troposfèric a Catalunya, per poder crear un sistema de predicció i per poder estudiar les causes i els mecanismes que intervenen en la seva formació. Es planteja un sistema de modelització Eulerià mesoscalar que constitueix un model de Qualitat de l'Aire adaptable a les necessitats de Catalunya. El sistema està format per un model meteorològic, un model d'emissions i un model fotoquímic de transport.

Anteriorment s'havia fet un estudi més local on es presentava una comparativa entre un model de Qualitat de l'Aire Eulerià i un model de columna Eulerià-Lagrangià aplicats a l'estudi d'episodis d'ozó troposfèric (Ortega et al., 2004). El disseny del model de columna Eulerià-Lagrangià en un sistema de predicció d'ozó per zones d'especial interès va ser la tesi doctoral del Dr. J. Beneito, dirigida per la Dra. Soler (Beneito, 2006). Aquest model es va aplicar com a eina per predir les concentracions d'ozó per zones concretes de Catalunya des de l'any 2003 (Beneito et al., 2007). El disseny d'un model de Qualitat de l'Aire Eulerià per aplicar a la modelització de l'ozó troposfèric a tot Catalunya es presenta en aquesta tesi i ha estat la base per a les campanyes de predicció que s'han i s'estan portant a terme pel Departament d'Astronomia i Meteorologia (UB) (<http://www.am.ub.es/ozo>). Aquest estudi s'emmarca dintre del projecte de la vigilància dels nivells d'ozó troposfèric a Catalunya que porta a terme el Departament de Medi Ambient i Habitatge, en compliment de la Directiva 02/03/CE adoptada en el Reial Decret 1796/2003.

Donat que l'ozó és un contaminant secundari, les emissions dels precursors que intervenen en la seva formació són indispensables per poder modelitzar-lo. Això va fer que el model d'emissions esdevingués un punt prioritari d'aquesta tesi. Les emissions són una de les principals causes d'error en tot model de Qualitat de l'Aire. Per aquest motiu s'ha elaborat un model d'emissions adaptat a les dades disponibles a la zona d'estudi. El volum d'informació que cal gestionar per a obtenir unes emissions precises és molt gran, i, a més, amb la dificultat afegida de que sovint no es tracta de dades públiques ni de fàcil accés. L'elaboració del model d'emissions MNEQA (Ortega et al., 2009a) ha suposat una part important de la feina i l'esforç que es presenten en aquesta tesi. El seu disseny i implementació ha permès finalment realitzar les simulacions del comportament de l'ozó troposfèric i el seu anàlisi per a diferents episodis d'interès (Ortega et al., 2009b), sobre l'àrea d'estudi (Catalunya). Per tant, l'objectiu inicial, la simulació mesoscalar de l'ozó troposfèric, ha esdevingut una realitat i, en certa manera, una aplicació del model d'emissions.

L'estructura que segueix aquesta tesi es relata a continuació:

En el capítol 1 es presenta l'ozó atmosfèric destacant-ne el troposfèric pel seu efecte en els éssers vius i en l'escalfament global. S'introdueix la química de l'ozó troposfèric, amb una primera visió simplificada de les reaccions químiques que es donen a l'atmosfera i que intervenen en la seva creació o destrucció. També es fa referència al cicle de l'ozó i la seva relació amb els hidrocarburs i els òxids de nitrogen. Finalment s'exposen les reaccions que intervenen més activament en el cicle de l'ozó. Com a mecanisme d'eliminació complementari a les transformacions químiques, la deposició de l'ozó s'exposa breument. En relació a les unitats utilitzades per l'ozó troposfèric s'adjunta l'apèndix 1.

En el capítol 2 s'introdueixen els models de qualitat de l'aire, les seves característiques i les classificacions més usals. En particular es comenten les característiques dels

models mesoscalars. Es descriu el seu funcionament i propietats, com són l'operativitat, la interrelació entre la part meteorològica i la part de reaccions químiques (models off-line i on-line) i la resolució temporal. Finalment s'introdueix el model de qualitat de l'aire utilitzat en aquesta tesi, que serà analitzat desglossadament en els capítols successius.

En el capítol 3 es descriu extensament el model d'emissions MNEQA, Model Numèric d'Emissions per a la Qualitat de l'Aire, un model nou generat per formar part d'un model de qualitat de l'aire aplicat a Catalunya. S'exposa la metodologia utilitzada en el càlcul de les emissions, tant biogèniques com antropogèniques. En les darreres, es consideren les emissions industrials, les emissions del trànsit, les emissions per l'ús de dissolvents i d'altres fonts mòbils i maquinària. Les emissions industrials s'han obtingut del Departament de Medi Ambient i Habitatge, es fa una comparació amb valors calculats a partir de dades de producció o de consum. Respecte les emissions del trànsit es consideren tant les emissions directes com les causades per l'evaporació del combustible. Per a les emissions del trànsit en ciutats es fa una interpolació de les emissions per a la ciutat de Barcelona. En aquest capítol es descriu bàsicament la metodologia que utilitza el model i en el capítol 4 es fa referència a la part més pràctica de com s'ha implementat i com està constituït el model d'emissions MNEQA. Els apèndixs 2, 3, 4 i 5 complementen la descripció del model d'emissions.

El capítol 4 constitueix la part aplicada del model d'emissions, s'exposa l'estructura del programa i la implementació dels mòduls que el constitueixen. Es fa una comparativa amb altres models d'emissions existents. Es presenten els resultats de l'aplicació del model d'emissions als casos d'estudi i es comparen els resultats amb les emissions del model EMEP. A l'apèndix 6 es pot trobar la descripció dels arxius que utilitza MNEQA i a l'apèndix 7 els resultats de les emissions per dia simulat.

En el capítol 5 s'analitza el model meteorològic utilitzat. Es descriu el model utilitzat, les equacions que descriuen el comportament de les variables meteorològiques. Es presenten les característiques meteorològiques dels casos d'estudi i es descriu l'entrada de la brisa marina per la rellevància sobre l'advecció de contaminants. Finalment es fa la validació segons els estadístics clàssics, presentats en l'apèndix 8, de les simulacions meteorològiques amb les dades d'estacions per la temperatura i el vent (mòdul, direcció i components).

En el capítol 6 es descriu el mòdul fotoquímic en termes generals i en concret el que s'ha emprat en aquesta tesi, el model CMAQ. Es comenten les característiques de les simulacions per als casos d'estudi, centrant l'atenció en l'ozó, objectiu prioritari de la simulació. Es fa la validació respecte a les concentracions obtingudes en les estacions de mesura de l'ozó, es fa la interpretació dels valors obtinguts i es compara amb resultats publicats.

Finalment en el capítol 7 es presenten les conclusions d'aquesta tesi diferenciant entre la part d'emissions i la part de simulacions fotoquímiques de qualitat de l'aire. S'exposa també la continuació de la línia de recerca.