

## 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](http://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](http://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](http://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.

## 2. MODELS DE QUALITAT DE L'AIRE

### 2.1. Introducció

Els models matemàtics que descriuen la química, la meteorologia i els processos que afecten a les concentracions dels contaminants i permeten estimar les concentracions en el temps i en l'espai, així com entendre els processos que hi intervenen s'anomenen models de qualitat de l'aire (AQM).

Els models de qualitat de l'aire en l'estudi dels contaminants atmosfèrics són de desenvolupament recent. Abans del segle XX, la contaminació no es tractava científicament sinó que es tractava com un tema legislatiu. Arrel d'alguns episodis de contaminació a Califòrnia i a Londres, el primer de tipus fotoquímic i el segon per causa de la crema de carbó en condicions de boira, es van començar a fer estudis en laboratoris cap a mitjans del S XX per entendre la formació de contaminants.

Actualment hi ha les dues vessants, científica i legislativa que actuen coordinadament, així es fan estudis d'impacte ambiental per decidir la conveniència o no de la ubicació d'una nova font emissora o es preveu el nivell de qualitat de l'aire a partir dels resultats de models en àrees on no hi ha estacions de mesura. Es fan prediccions de les concentracions dels contaminants per poder alertar la població, de la mateixa manera que es prediu el temps. També es programen accions per reduir la contaminació en base als resultats d'aquests models.

Tot i que és un camp que ha avançat enormement en els darrers anys, la diversitat de models existents és una mostra de com ha evolucionat el sector (COST 728/732). No obstant això, els múltiples processos que intervenen en els models de qualitat de l'aire fan que hi hagi molts punts susceptibles de ser millorats. A més, al ser els models de qualitat de l'aire una concatenació de diferents mòduls, un punt important és la propagació de l'error de cada un d'ells, per la qual cosa cal disminuir tant com sigui possible aquestes fonts d'errors.

### 2.2. Classificació dels models

Els models es poden classificar en base al tractament dinàmic en Eulerians i Lagrangians. Els primers estudien l'evolució en el temps dels processos que experimenta una parcel·la d'aire situada en un lloc concret. Els Lagrangians estudien els processos que es donen a la parcel·la d'aire en el transcurs del seu moviment per l'atmosfera.

En base a l'extensió que cobreix el model es pot parlar de models de microescala, quan la resolució és d'uns pocs centernars de metres o menor ( $\approx 5$  m), models de mesoscala o locals, resolució de pocs quilòmetres ( $\approx 1-10$  km), models d'escala regional amb resolució de l'ordre de decenes de quilòmetres ( $\approx 20$  km), models d'escala sinòptica (resolució  $\approx 80$  km) i models globals quan inclouen tot el globus terraquí ( resolució  $\approx 5^\circ$  ). Les dimensions que apareixen a la Taula 2.1. són aproximades, i poden variar en funció de l'autor, la idea és que es reproduïxen els fenòmens característics a cada escala. En aquest sentit l'augment de càlcul dels ordinadors està permeten millorar les prestacions en cada cas, tant de dimensions dels dominis com de la resolució horitzontal i vertical, tot i que de vegades es pot cometre l'error de treballar amb parametritzacions d'una escala superior aplicades a major resolució de la que seria convenient.

Taula 2.1. Classificació dels models de contaminació en base a l'escala espacial (Seinfeld i Pandis, 1998)

Models	Dimensions típiques (x,y,z)
Microescala	200 x 200 x 100 m
Mesoescala	100 x 100 x 5 km
Regional	1000 x 1000 x 10 km
Sinòptica	3000 x 3000 x 20 km
Global	65000 x 65000 x 20 km

Atenent a la dimensionalitat dels models es poden classificar en models d'ordre zero (D-0), models d'una dimensió (D-1), models bidimensionals (D-2) o models tridimensionals (D-3). Els més senzills i els primers que es van desenvolupar van ser els models de capsa (D-0), en els quals una capsa (hexàedre) tanca la part de l'atmosfera que es vol estudiar, es suposa homogènia, el model estudia l'evolució amb el temps de les concentracions de les espècies  $c_i(t)$ . Una mica més complicats són els models unidimensionals (D-1) o de columna, es componen per capses apilades una a sobre de l'altre, en aquest cas hi ha homogeneïtat horitzontal però amb concentració variable en altura o per cada capsa, el model determinarà l'evolució en el temps i en alçada  $c_i(t,h)$ . En els models en dos dimensions hi ha un conjunt de capses, de forma que les concentracions són homogènies en una dimensió però varien en les altres dues dimensions espacials, per exemple són funció de l'alçada (h) i la latitud ( $^\circ$ ) però no de la longitud, els resultats seran de la forma  $c_i(t,h,^\circ)$ . Finalment, els models en tres dimensions estudien tot el camp de concentracions de tota la zona d'estudi  $c_i(t,x,y,z)$ .

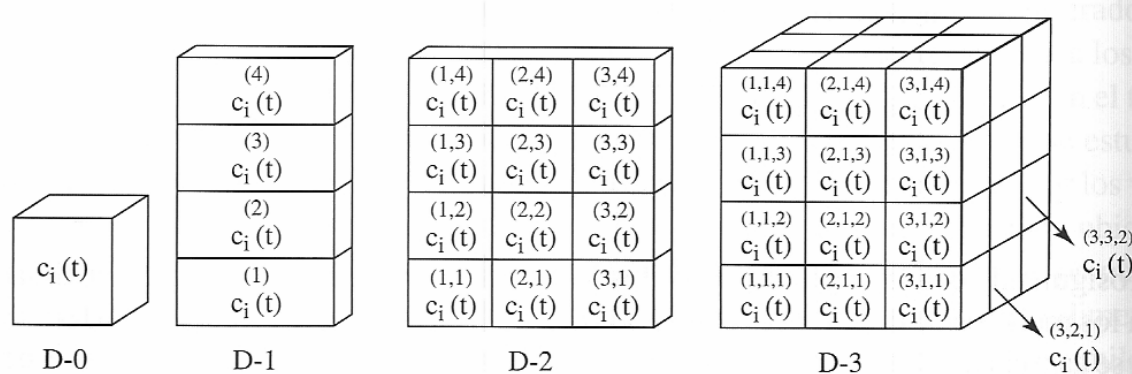


Figura 2.1. Representació de les dimensions dels models de qualitat de l'aire (Extret de Figueruelo i Dávila, 2004)

En la web de "European Topic Centre on Air and Climate Change" (ETC/ACC) (<http://etc-acc.eionet.europa.eu/>) que dona suport a l'Agència Europea del Mediambient (EEA) en temes de control de la contaminació de l'aire i el canvi climàtic es troba un catàleg amb 123 models de qualitat de l'aire o relacionats, per donar informació als

usuaris de les prestacions dels models. Amb aquesta informació es vol facilitar la tria entre els models per cada aplicació concreta. A més, arrel de les accions COST 728/732 iniciades el 2004, també es va fer un inventari de models (<http://www.mi.uni-hamburg.de/index.php?id=539>). En aquests inventaris de models de qualitat de l'aire n'hi ha de gaussians, de quasi-gaussians, plume-rise (elevació del plumall), Lagrangians, models de contaminació estadístics, models de diagnòstic, de dinàmica de fluids amb els models CFD (computational fluids dynamics), models Eulerians meteorològics i/o de qualitat de l'aire. O en relació a l'escala, trobem la classificació en models de microescala, de mesoscala i de macroscala. De tots aquests diferents tipus de models, els mesoscalars són els que ens interessa examinar en aquesta tesi i per això se'n fa l'explicació.

### **2.3. Model de qualitat de l'aire mesoscalars**

Els models Eulerians subdivideixen l'espai en cel·les en forma d'hexaedre (o aproximadament, dependrà de la projecció en que es treballi). Per cada cel·la es resoldran les equacions de continuïtat de les espècies (veure capítol 6), obtenint-ne així les concentracions per cada cel·la i per tant per tot l'espai considerat amb la resolució de la cel·la.

Les entrades principals (els anomenats inputs) en un model Eulerià són:

- Les emissions: les quantitats de contaminants que són injectats a l'atmosfera.
- Les dades meteorològiques: temperatura, vent, radiació, alçada de la capa de barreja...
- Condicions inicials: l'estat de l'atmosfera i el valor de les concentracions de contaminants en el moment de l'inici de la simulació.
- Condicions de contorn: l'estat de l'aire i el valor de les concentracions de contaminants en el contorn del domini simulat.

Aquestes informacions han de ser donades amb la mateixa resolució de la graella del model Eulerià de qualitat de l'aire. Per aquest motiu els models fotoquímics de qualitat de l'aire normalment necessiten d'un model d'emissions i d'un model meteorològic que els proporcioni les dades necessàries per la seva execució (veure Figura 2.2.).

Un model fotoquímic de qualitat de l'aire consta de tres mòduls: un mòdul meteorològic, un mòdul d'emissions i un mòdul fotoquímic. De vegades al mòdul fotoquímic o de contaminació se l'anomena model de contaminació, però ell per sí sol no és executiu, necessita de les entrades meteorològiques i d'emissions per executar-se. Donada aquesta dependència es pot parlar del model de qualitat de l'aire com un tot format pels tres mòduls esmentats, si bé, a la literatura de vegades trobem referit model de qualitat de l'aire com el model fotoquímic o mòdul fotoquímic, es pot reconèixer pel context a quin dels dos significats s'està fent referència.

A la Figura 2.2. es pot veure l'esquema de funcionament d'un model de qualitat de l'aire. Primerament cal executar el model meteorològic, seguidament el model d'emissions que es pot alimentar de la sortida del model meteorològic i en darrer terme el mòdul fotoquímic, que s'alimenta tant del primer model com del segon.

El fet de ser el darrer model a executar-se provoca que hi hagi més risc en el no encert dels resultats, ja que si algun dels dos primers mòduls conté errors aquests es

propagaran cap al resultat del model fotoquímic. Una altra manera d'entendre-ho és com ja s'ha comentat, com un model format de tres mòduls, des d'aquesta visió s'hauria d'analitzar l'encert de totes les variables, és a dir les meteorològiques, les emissions i les concentracions de contaminants.

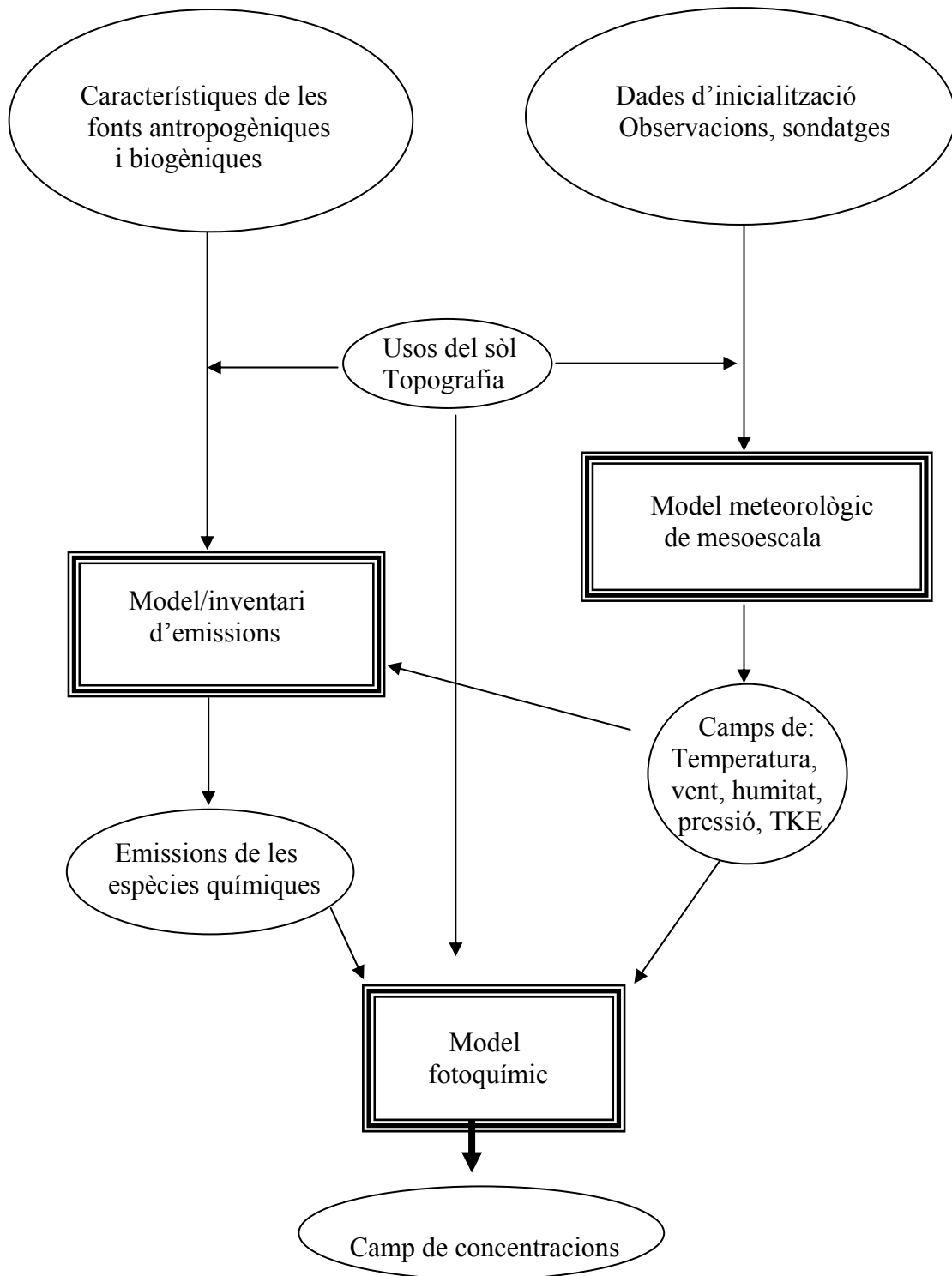


Figura 2.2. Esquema de funcionament d'un model fotoquímic de qualitat de l'aire

El resultat del model seran les concentracions per cada cel·la, per totes les espècies químiques considerades. Aquests valors són representatius de la cel·la, si bé poden no ser coincidents amb mesures d'estacions, ja que són més localitzades, s'espera que el comportament de les mesures d'estacions es vegi reflectit en el resultat del model. En comparar mesures amb model, s'està suposant que l'estació de mesura està col·locada en un lloc representatiu de la zona.

#### **2.4. Model operatiu**

És diu d'un model que és operatiu quan s'aplica per poder-ne fer una previsió a temps real, quan coneixem els resultats del model per un temps que encara no ha passat. En aquest treball s'utilitza el model com no operatiu ja que s'estudien casos passats, però el model s'ha dissenyat per poder ser operatiu. L'objectiu ha estat preparar i establir una base per fer posteriorment una modelització operativa d'ozó a Catalunya, estudiant amb un model Eulerià episodis amb altes concentracions d'ozó troposfèric i establint les mancances, els encerts i les possibles millores.

La modelització és necessària per estudiar i conèixer els nivells d'ozó a zones on no hi ha estacions de mesura i per poder predir i crear plans d'acció a fi de combatre els nivells elevats d'ozó. Els models fotoquímics són eines de gestió i pronòstic mediambiental que en els darrers anys s'han anat perfeccionant fins oferir uns resultats força precisos. Cal adaptar els models a cada zona, mitjançant l'ajust dels paràmetres i l'estudi de les característiques dels episodis de contaminació. És imprescindible conèixer les mancances i els encerts del model abans d'aplicar-lo com a eina de pronòstic en una nova zona.

Els models de qualitat de l'aire són eines de gestió i pronòstic mediambiental que cal adaptar a cada zona d'aplicació, mitjançant l'ajust dels paràmetres i l'estudi de les característiques d'episodis de contaminació ocorreguts.

#### **2.5. Models off-line i on-line**

A més del requeriment en la concentració de satisfer l'equació de continuïtat de les espècies, les velocitats del fluid i la temperatura han de satisfer l'equació de Navier-Stokes i l'equació d'energia. En general seria necessari resoldre el sistema d'equacions de conservació de la massa, el moment i l'energia per considerar els canvis en la velocitat, la temperatura i les concentracions i les interaccions entre ells. Però quan es tracta dels contaminants atmosfèrics, donat que les concentracions són petites, es pot assumir que la presència dels contaminants afecta de forma menyspreable a la meteorologia. Aquesta suposició permet resoldre l'equació de continuïtat de les espècies independentment de les altres (la de moment i energia). Aquesta hipòtesis de que la concentració de les espècies contaminants no afecta la meteorologia no seria vàlida si es generés una quantitat de calor important en les reaccions químiques, de forma que la temperatura es veiés afectada. O bé, si la capa contaminada fos tan concentrada que l'absorció, reflexió i dispersió de la radiació per part dels contaminants tingués com a resultat l'alteració del comportament del fluid. Considerar que aquests efectes són menyspreables significa tractar l'equació de continuïtat de les espècies de forma off-line, és a dir considerant que no afecta a l'evolució dels paràmetres meteorològics que defineixen l'estat de l'atmosfera. El cas de considerar l'efecte dels contaminants sobre els paràmetres que defineixen l'atmosfera, s'anomenen models on-line i són molt més costosos en termes de temps de càlcul.

## 2.6. Resolució temporal

La resolució temporal d'un model Eulerià de qualitat de l'aire (és a dir, el període de temps per al que les concentracions són promitjades) pot variar d'alguns minuts a un any. Per exemple, un model pot predir la concentració d'un contaminant en promitjos de 15 minuts en funció de la posició. Els requeriments a l'implementar un model estaran fortament governats per la seva resolució temporal i aquesta dependrà del propòsit de la modelització.

Els models basats en la descripció fonamental del transport atmosfèric i els processos químics poden tenir resolució temporal d'uns pocs minuts a un any. En general, la base d'aquests models és l'equació de continuïtat per a una espècie individual. Aquests models requereixen la resolució en el temps d'una equació diferencial basada en l'equació de continuïtat. Es poden anomenar models dinàmics, donat que descriuen l'evolució de les concentracions dels contaminants en el temps per diferents punts de l'espai. Per tant, els models dinàmics simulen el comportament temporal en temps real dels contaminants de l'aire a l'atmosfera. Aquests models requereixen com entrades (inputs) les distribucions temporals i espacials de les emissions sobre la regió d'interès, la distribució espacial i temporal de les variables meteorològiques pertinents, i informació en el període de temps d'integració del canvi en les concentracions en un punt com a resultat dels processos de transformació i d'eliminació.

Si s'assumeixen certes simplificacions en l'equació de continuïtat, com emissions i meteorologia estacionàries, llavors l'equació es pot integrar sobre el període de temps per obtenir un model d'estat estacionari. Aquest model serà capaç de predir la distribució espacial de les concentracions dels contaminants en l'aire sota les condicions d'emissions i meteorologia invariants en el temps.

## 2.7. AQM i dominis d'aplicació

Amb l'objectiu de modelitzar l'ozó a Catalunya s'ha utilitzat el sistema de modelització de qualitat de l'aire MM5/MNEQA/CMAQ per fer diferents simulacions. El model meteorològic utilitzat és el Penn State University/National Center Atmospheric Research Mesoscale Model conegut com MM5 (Grell et al., 1994) (veure capítol 5). MNEQA és el Model Numèric d'Emissions per la Qualitat de l'Aire desenvolupat i descrit àmpliament en aquesta tesi (veure capítols 3 i 4). Com a mòdul fotoquímic s'utilitza el model Community Multiscale Air Quality, CMAQ, un model fotoquímic i de partícules desenvolupat per l'Agència de Protecció Medi Ambiental Americana (EPA) (veure capítol 6).

MNEQA s'alimenta d'MM5 i CMAQ s'alimenta d'ambdós, per la qual cosa l'àmbit d'aplicació de tots ells està íntimament relacionat. Els períodes triats per fer les simulacions corresponen a l'any 2003, són tres situacions amb altes temperatures i nivells alts d'ozó. I una situació amb vents de nord-oest i temperatures baixes per l'època de l'any (juliol). Totes les situacions estudiades presenten ínfima nuvolositat, per evitar el problema de la predicció de núvols, camp d'estudi pels models meteorològics (Krishnamurti and Bounoua, 1996).

Normalment els models de qualitat de l'aire treballen amb dominis aniuats a l'igual que els models meteorològics. Per això treballen a diferents resolucions en diferents porcions del territori o dominis. Hi ha un domini mare que és el més exterior i de menor resolució, amb cel·les que cobreixen més extensió. A partir del domini mare es defineix un domini amb major resolució que cobreix una zona més petita a l'interior del domini

mare. Es poden anar definint altres dominis a l'interior fins obtenir el grau de resolució desitjat.

Els dominis triats per fer les modelitzacions d'ozó amb MM5/MNEQA/CMAQ inclouen un domini mare, D1 amb resolució de cel·la 27x27 km<sup>2</sup>, domini més exterior que comprén el sud d'Europa, incloent la Península Ibèrica, el Sud de França i el Nord d'Itàlia, i una part del Nord d'Àfrica. Un domini anomenat D2, centrat en Catalunya amb resolució 9x9 km<sup>2</sup>. I dos dominis amb resolució de cel·la 3x3 km<sup>2</sup>, un centrat a la zona de Tarragona (D3) i un altre centrat a la plana de Vic (D4). Els dominis es poden veure a la Figura 2.3., i la descripció de nombre de quadrícules i les relacions entre ells estan descrites a la Taula 2.2.

Taula 2.2. Característiques dels dominis simulats.

(x,y) (long,lat)	D1(Mare)	D2	D3	D4
Resolució horitzontal (km)	27	9	3	3
# cel·les MM5 (x,y)	(68, 44)	(30, 30)	(30,30)	(33, 30)
# cel·les MNEQA/CMAQ	(66, 42)	(28, 28)	(28,28)	(31, 28)
# nivells verticals	30	30	30	30
Centre (lon, lat)	(1.40 , 41.42)			
Inici respecte D1	(1, 1)	(31, 19)	(34, 21)	(35, 23)

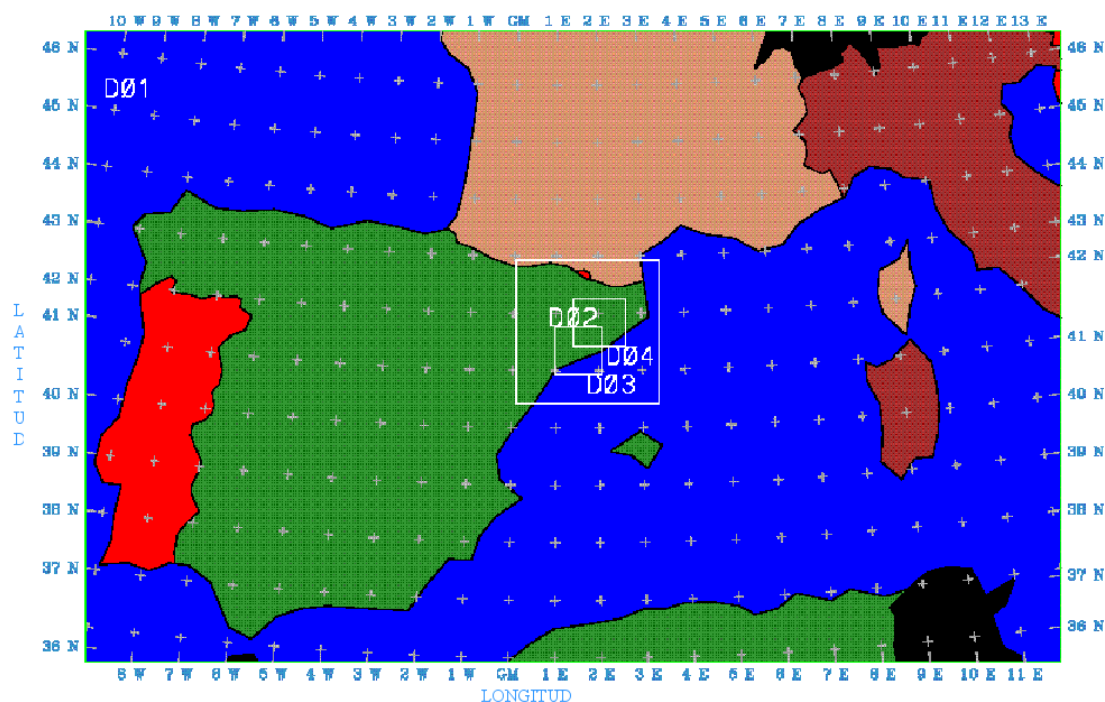


Figura 2.3. Dominis emprats en les simulacions amb MM5/MNEQA/CMAQ



