

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.

7. Conclusions i futur

7.1. Conclusions del model d'emissions

S'ha descrit la necessitat d'un model d'emissions en el context de la modelització mesoscalar de l'ozó troposfèric. Per a estudiar el comportament d'aquest contaminant a Catalunya ha estat indispensable l'elaboració d'unes emissions acurades i preparades per ésser integrades en un model de qualitat de l'aire. Amb aquesta finalitat s'ha desenvolupat el model MNEQA, que proporciona les emissions dels precursors i dels contaminants fotoquímics. L'estudi de l'ozó troposfèric i de la seva predicció depenien entre d'altres d'aquest model d'emissions.

El model d'emissions MNEQA s'ha descrit de forma extensiva i s'han avaluat els seus resultats. El model ha estat dissenyat per a treballar conjuntament amb un model meteorològic i un model fotoquímic de transport, pensant en un sistema de qualitat de l'aire, però també amb l'objectiu d'obtenir una eina independent que actuï únicament com a model d'emissions. En aquest sentit, té les capacitats de processador d'emissions i d'eina de càlcul d'emissions, essent capaç d'obtenir les emissions a partir de dades locals, com són els usos del sòl o el nombre de vehicles en circulació, i dels factors d'emissió adequats. S'ha seguit la metodologia descrita a EMEP/CORINAIR (2004), recomanada per a Europa. El model té una estructura modular amb la finalitat de ser fàcilment actualitzable i poder incorporar nous sectors emissors.

El model s'ha aplicat a quatre casos d'estudi per a mostrar la seva operativitat, en una primera fase. Els resultats del model s'han mostrat i valorat en base als resultats d'aquestes simulacions. La distribució espacial obtinguda és coherent amb la distribució de població i les característiques de trànsit i indústria de Catalunya. L'estructura del model permet utilitzar-lo en altres àrees, però caldria preparar fitxers amb els inputs necessaris i adaptats a aquestes altres àrees. Recentment s'ha adaptat el model d'emissions per a la resolució de 3 km per a tota Catalunya.

Per a avaluar les emissions s'ha comparat amb el model EMEP (Vestreng et al., 2006), mostrant discrepàncies en les emissions de NO_x del 4.7 % per al trànsit, del 32 % per a la indústria i una discrepància total en l'NO_x del 5%, essent major els valors del model MNEQA que els de EMEP en tots els casos. Un comportament diferent s'observa en els VOCs emesos. Per al sector trànsit hi ha de nou una diferència positiva, MNEQA dona major emissió que EMEP amb una diferència del 44.1 %. En la indústria la diferència és negativa amb un valor de -46.7 %. Les emissions totals de VOCs donen una diferència de -18.5 %, essent major la quantitat considerada en el model EMEP que en el model MNEQA. També s'ha considerat la distribució espacial de les emissions, trobant que el model EMEP atribueix més emissió a la zona central de Catalunya que a la costa. És en aquesta darrera zona (la costa) on MNEQA atribueix la major part de les emissions al trànsit i la indústria, dos dels sectors més importants. D'altra banda, una part important de les diferències entre tots dos models és atribuïble a la diferent metodologia utilitzada en la distribució espacial: MNEQA utilitza metodologia bottom-up, i EMEP top-down, respecte la distribució espacial. És d'esperar que la metodologia bottom-up sigui més acurada, donat que parteix de dades més locals a partir de les quals obté emissions per a una àrea més extensa.

El model MNEQA té algunes mancances com són les emissions del trànsit aeri i del trànsit marítim. El llistat d'indústries considerades pot necessitar una revisió en el que respecta a les emissions de VOCs, donat que l'inventari utilitzat (DMAH, 2008) s'havia creat per a el control de NO_x i no era tan bo en el què respecta als VOCs. Evidentment,

el model es pot millorar, però com a estructura operativa està funcionant de forma acurada per donar els nivells previstos de concentració d'ozó diàriament (<http://www.am.ub.es/ozo>).

7.2. Conclusions del model de qualitat de l'aire

El model de qualitat de l'aire format per MM5/MNEQA/CMAQ s'ha aplicat a quatre simulacions de l'any 2003. Un cop avaluat el model MNEQA i considerant que les emissions tenen la distribució esperada i la qualitat necessària s'ha procedit a l'anàlisi dels altres components del model de qualitat de l'aire.

L'estudi de les simulacions meteorològiques mostra discrepàncies lleus en el pronòstic de la temperatura, amb un error quadràtic mig de 3.5 K i una desviació de -1.7 K, que ens indica que el model tendeix a infravalorar la temperatura. En el mòdul del vent l'error quadràtic mig és de 1.7 m/s i la desviació 0.4 m/s, en aquest cas el model sobrevalora el mòdul del vent. En quan a les components, la desviació és petita, i no es pot determinar una tendència clara del model per a les components de la velocitat. Cal a dir que en el càlcul d'estadístics s'han considerat totes les estacions disponibles; potser s'hauria d'haver fet un estudi previ per determinar si totes les estacions són representatives de les àrees en les que es troben. No s'ha d'oblidar que el model dóna un valor per a una regió amb la resolució de la cel·la i té una representació del territori en valor mig, per a aquesta zona.

En la validació, per als dominis amb major resolució no s'observen millores; l'error és del mateix ordre per a la temperatura i per al vent. S'ha vist que les dades de les simulacions entre dominis, per a un mateix punt, concorden més entre elles que amb les mesures de l'estació.

Per a l'aplicació en el model de Qualitat de l'Aire s'han introduït les emissions especiades, és a dir, no s'han utilitzat els valors de NO_x o VOC genèrics sinó que s'han utilitzat les espècies del mecanisme químic CBM-IV, seguint la metodologia exposada en el capítol 3. L'especiació és una font important d'incertesa, a causa de la manca de dades locals; la indústria pot tenir unes característiques molt diferents en cada àrea i aplicar un perfil d'especiació genèric no té en consideració aquestes característiques que poden tenir una importància decisiva en la formació de contaminants fotoquímics com l'O₃.

Les simulacions d'O₃ mostren valors moderats de concentració d'ozó, amb valors alts durant el dia que descendeixen a la nit, de forma més marcada en les zones més urbanes. Hi ha diferències entre les diferents simulacions; per exemple, en la simulació del juny s'observa un màxim de 160 µg/m³, mentre que en la simulació del juliol el màxim simulat per a tot el període és de 124 µg/m³. El model reacciona diferent davant de les diverses condicions meteorològiques i emissions; no oblidem que les emissions depenen de la temperatura i aquesta és diferent per a cada període i per a cada dia. No obstant això, el patró per a l'ozó conté poques inhomogeneïtats en el territori, en part a causa dels valors màxims en la sortida del model que són nivells moderats, tot i estar simulant situacions amb concentracions mesurades elevades.

La comparació qualitativa entre els valors observats d'O₃ i els simulats mostra bons resultats en les zones de qualitat de l'aire més urbanes, com són la zona 1, àrea de Barcelona, i la zona 2, Vallès i Baix Llobregat. El model no reproduïx els mínims nocturns d'algunes estacions, com per exemple a Vilanova i la Geltrú, on el model actua com si es tractés d'una zona rural, possiblement a causa de la proximitat a la costa i la influència de la brisa en la dispersió. Altres estacions com les de Pardines o Vic,

tingueren valors alts de concentració d'O₃ i el model no arriba a simular les pujades per als dies d'interès. Una causa pot ser que l'advecció no està ben reproduïda. O perquè hi ha una manca d'emissions locals, que podrien venir dels purins, la zona és coneguda per la forta indústria porcina. Els valors estadístics de la comparació entre simulació i observacions no mostren uns resultats tan bons com s'hauria esperat, possiblement perquè s'han considerat totes les hores i totes les estacions. Com s'ha esmentat anteriorment, caldria comprovar que les estacions siguin representatives de tota l'àrea que engloba la cel·la coincident en el model.

7.3. Continuació de la línia de recerca

Aquest treball ha constituït un inici per a la modelització de l'ozó troposfèric a Catalunya, amb l'aplicació d'un model Eulerià. Una continuació clara d'aquest treball és el manteniment i actualització de les dades base utilitzades en el model d'emissions per a poder utilitzar-ho per a altres anys i en altres simulacions, feina que està duent a terme el grup de Micrometeorologia del Departament d'Astronomia i Meteorologia.

Caldria ampliar les sortides de MNEQA en relació a altres mecanismes químics i fer-les compatibles a altres models fotoquímics. Això aportaria més possibilitats d'aplicació d'aquest model d'emissions, permetent noves configuracions per al model de qualitat de l'aire aplicat a la zona d'estudi.

Respecte al model de qualitat de l'aire, el següent pas és fer un estudi exhaustiu de sensibilitat exhaustiu del model, tant a les condicions meteorològiques com a les emissions, en tots els dominis d'aplicació. L'estudi de sensibilitat permetrà determinar quins factors tenen més importància en el model, aplicat a la zona d'estudi, i, per tant, quins caldrà prioritzar i en quina direcció intensificar-ne l'esforç, per a què siguin més precisos.

El model ha de ser una eina ben coneguda, per tal de poder ser aplicat en les millors condicions. Així, la utilització diària del model permetrà la seva aplicació a situacions ben diverses, de manera que es podrà discriminar en quins casos el model respon segons s'espera i en quins casos el model no és adequat per a fer la predicció.

Un altre punt a considerar en un futur és l'aseva validació per a altres contaminants diferents de l'O₃ com són els òxids de nitrogen i les partícules. A més, seria convenient, fer comparacions amb altres models aplicats a la zona, per a determinar diferències en l'actuació i analitzar com es comporten altres parametritzacions en les diferents condicions meteorològiques.

