



# 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](http://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](http://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](http://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**



## **1. Introducció**

Durant les últimes dècades la quantitat de gasos i partícules contaminants que s'han injectat a l'atmosfera ha augmentat considerablement. Evidència d'aquesta informació són les elevades concentracions de diòxid de nitrogen o partícules amb una grandària inferior a  $10\mu\text{m}$  (PM10) que es mesuren habitualment en zones urbanes i industrials, o les també altes concentracions d'ozó en moltes zones rurals situades a sobrevent de zones urbanes o industrials, on les concentracions dels seus precursors, fonamentalment òxids de nitrogen, són molt baixes en condicions normals.

Paral·lelament però, a l'augment de la concentració de contaminants, s'ha potenciat de forma considerable la sensibilització de la població i de l'administració a la qualitat de l'aire que respirem. D'aquesta manera és ja una necessitat en els països desenvolupats el poder disposar d'eines de control, gestió i avaluació de la contaminació atmosfèrica. Aquest fet ha impulsat que en els darrers anys s'hagin produït importants avenços en els sistemes per a la modelització de la qualitat de l'aire fins a esdevenir eines de gestió i pronòstic ambiental que ofereixen resultats força precisos. A més, la modelització de la qualitat de l'aire s'ha convertit en una eina totalment necessària per poder conèixer els nivells d'immissió a zones on no es disposa d'estacions de mesura i per poder crear plans d'actuació per tal de poder combatre nivells elevats dels diversos contaminants.

És per aquest motiu que en aquesta tesi doctoral es descriu la recerca i el desenvolupament d'un sistema de modelització de la qualitat de l'aire. S'ha utilitzat com a punt de partida els treballs anteriors, i es descriu l'acoblament dels diferents models que el componen. Els models són adaptats a la zona d'estudi mitjançant l'ajust de diversos paràmetres i són utilitzats de forma depenent entre ells. L'avaluació estadística dels pronòstics del sistema s'utilitza com el camí per a la localització d'incerteses i posterior refinament del model. Aquest procés d'acoblament i execució del sistema per períodes llargs de temps, validació dels resultats, localització d'incerteses i anàlisi de sensibilitat, esdevé un procés continu i cíclic durant la tasca de recerca del doctorand, fins a obtenir resultats dels paràmetres estadístics dins de les recomanacions de la comunitat científica i acomplint els requeriments de la legislació per a la utilització operativa del sistema.

A continuació es presentarà l'objectiu fonamental de la tesi conjuntament amb una breu descripció dels passos i reptes seguits per assolir-ho. Finalment es descriu la estructura del document per una major facilitat de lectura.

### **1.1. Objectiu de la tesi i procés cronològic**

Degut a la problemàtica comentada en l'apartat anterior, cada vegada són més els estudis que es realitzen per investigar iniciatives de reducció de la contaminació atmosfèrica i per implementar models de pronòstic de qualitat de l'aire. És per aquests motius que l'objectiu final i fonamental d'aquesta tesi ha estat implementar un sistema de pronòstic de la qualitat sobre l'àrea d'interès que sigui actual, àgil i efectiu.

Assolir aquest ambiciós objectiu ha suposat per al doctorand anar assolint reptes i metes durant la fase de recerca. A continuació s'exposaran breument cadascun dels passos seguits per tal d'aconseguir aquest objectiu segons ordre cronològic:

- 1) Contribució a la creació i millora del Model Numèric d'Emissions per la Qualitat de l'Aire MNEQA. Incorporació del material particulat a la primera versió de MNEQA (Ortega, 2009a) i noves fonts emissores no considerades fins llavors. També es participa activament en el procés d'automatització del model d'emissió.
- 2) Participació en el primer acoblament dels models meteorològic, d'emissió i fotoquímic utilitzant una resolució horitzontal de 9km. Execució personal de les simulacions diàries amb una finestra de 48h durant el període 1 de Maig – 30 de Setembre de 2008. Validació dels resultats i localització de les causes d'incertesa.
- 3) Estudi de les causes d'incertesa del sistema de modelització i refinament considerable del model d'emissió, incorporant noves fonts d'emissió i noves metodologies. Paral·lelament es col·labora en la disminució de la resolució horitzontal del sistema a 3km.
- 4) Definició i acoblament d'algoritmes de correcció als resultats de la modelització que a posteriori aconseguen millorar sensiblement la previsió. Aplicació al pronòstic de l'ozó troposfèric.
- 5) Paral·lelament es col·labora en l'estudi del sistema de modelització sota condicions meteorològiques diferents. Així, s'estudia per una part el paper de l'aerosol marí en els models de qualitat de l'aire i la seva influència en els valors d'immissió de material particulat en situacions de brisa i de vents intensos. I es participa també en l'estudi a molt alta resolució del transport de contaminants per efecte de la brisa i l'afectació sobre els nivells d'ozó i material particulat.
- 6) Inici de la operativitat del sistema i participació en la execució de les simulacions diàries amb una finestra de 48h durant el període 1 de Maig – 30 de Setembre de 2009. Validació estadística i de forma exhaustiva dels resultats del sistema de previsió per tots els contaminants atmosfèrics considerats. Es realitzen anàlisis de sensibilitat del sistema a canvis en les emissions i d'altres paràmetres del model per aconseguir disminuir la incertesa i augmentar la precisió dels pronòstics.
- 7) Realització d'un anàlisi de sensibilitat del sistema de modelització a diversos esquemes de capa límit i superficial, treballant amb diversos models meteorològics per tal d'analitzar les implicacions que suposa la substitució del model meteorològic del sistema.
- 8) Participació activa en el desenvolupament de la web del grup de Recerca i Modelització Atmosfèrica Meso i Microescalar MAiR ([www.ub.edu/mair](http://www.ub.edu/mair)). Es participa en la execució de les simulacions diàries amb una finestra de 48h durant el període 1 de Maig – 30 de Setembre de 2010. Es validen estadísticament i de forma exhaustiva els resultats del sistema de previsió per tots els contaminants atmosfèrics considerats.
- 9) En l'estadi final de la formació, el doctorand s'ha dedicat a la redacció d'aquesta tesi doctoral i a la publicació d'articles que inclouen els resultats més importants de la recerca fonamental realitzada.

## **1.2. Estructura del document**

El document s'estructura en deu capítols diferents, incloent aquesta introducció i la bibliografia.

En el capítol 2 es comenta d'una manera generalitzada les principals característiques de la contaminació atmosfèrica focalitzant l'estudi en l'ozó troposfèric, el diòxid de nitrogen i el material particulat. S'inclou quin és el marc normatiu i la legislació vigent envers la contaminació atmosfèrica, tant a nivell regional com estatal i europeu. Es presenta l'estat de l'art de la modelització atmosfèrica i el paper que representa com a eina de gestió i pronòstic mediambiental. Alhora es fa referència a les característiques de la concentració de gasos i aerosols a Catalunya, puntualitzant sobre les situacions meteorològiques que afavoreixen episodis amb alts nivells de immissió i comentant l'estat actual de la qualitat de l'aire a la regió.

En el capítol 3 es descriu extensament el sistema de modelització de la qualitat de l'aire que el doctorand ha utilitzat en els posteriors capítols i en el que ha tingut un paper fonamental en la seva implementació i execució. Conjuntament, es comenten les característiques principals de cadascun dels models Eulerians que el constitueixen, el model meteorològic MM5 (*PSU/NCAR mesoscale model*), el model d'emissió MNEQA i el model fotoquímic CMAQ (*Community Multiscale Air Quality Modelling System*).

En el capítol 4 s'expliciten totes i cadascuna de les contribucions del doctorand al model MNEQA utilitzat dins el sistema de modelització de la qualitat de l'aire, partint de la primera versió del model com a referència i definint tots i cadascun dels canvis desenvolupats pel doctorand.

En el capítol 5 es descriu el sistema de post-processat acoblat al sistema de modelització desenvolupat íntegrament pel doctorand, incidint en els algorismes matemàtics utilitzats per tal de definir un sistema de previsió de la qualitat de l'aire. Alhora es comenta la participació del doctorand en la gestió i difusió dels resultats.

En el capítol 6 es presenten els resultats de la validació estadística dels pronòstics del sistema de modelització aplicat sobre l'àrea de Catalunya (AQM.cat), per diverses variables meteorològiques i els diferents contaminants atmosfèrics durant períodes llargs de temps. S'inclou la presentació, definició i interpretació dels diferents paràmetres estadístics utilitzats i una avaluació exhaustiva estació per estació de mesura.

El capítol 7 presenta diferents apartats que contemplen estudis de sensibilitat i diagnòstic que el doctorand ha realitzat sobre el sistema de modelització durant la etapa de implementació i refinament d'aquest.

En el capítol 8 es presenta la incorporació del model WRF (*Weather Research and Forecasting Model*) al sistema de modelització i un important estudi de comparació dels pronòstics utilitzant els models meteorològics MM5 i WRF sota diferents esquemes de capa límit i superficials.

Finalment al capítol 9 es presenten les principals conclusions d'aquest treball i les línies de treball de futur que el doctorand contempla per tal de seguir desenvolupant aquesta línia de recerca.

També s'inclou un annex que resum la activitat investigadora del doctorand durant aquests anys, incloent els articles que ha publicat i en els que ha contribuït, els projectes en els que ha participat i els congressos als que ha assistit; conjuntament es presenta informació addicional necessària durant el desenvolupament del redactat d'aquesta tesi doctoral.