

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



AGRAÏMENTS

Abans de començar la exposició d'aquesta tesi doctoral vull agrair a totes aquelles persones i institucions que han participat, contribuït i/o ajudat d'una manera directa o indirecta durant els anys de recerca del doctorand.

Com a institucions, agraeixo al Departament de Medi Ambient i Habitatge (2006-2010) de la Generalitat de Catalunya, al Servei Meteorològic de Catalunya i a la Universitat de Barcelona, la possibilitat de participar durant sis anys en els convenis de col·laboració associats a les Campanyes d'Ozó Troposfèric dels anys 2006, 2007, 2008, 2009, 2010 i 2011. Especialment als tècnics de la secció d'immissions de l'actual Departament de Territori i Sostenibilitat, i del Servei, pel suport ofert durant aquests anys i la proporció de dades de les estacions de mesura. I al *Gobierno de España* per dotar-me d'una ajuda per a la *Formación del Personal Investigador* en el marc del projecte de recerca fonamental anomenat TRANSCLA (CGL2006-12474-CO3-02).

A tot el Departament d'Astronomia i Meteorologia de la Universitat de Barcelona i en especial al grup de Recerca i Modelització Atmosfèrica a nivell Meso i Microscalar (MAiR) on he pogut desenvolupar la tasca de recerca que aquí es presenta.

A la meva directora de tesi, professora i companya de feina, la Dra. Maria Rosa Soler, un agraïment molt especial i sincer ja que sense la seva ajuda, confiança i acolliment no hauria pogut haver fet front aquest repte.

A tots els companys que han anat passant en un moment o un altre pel grup de treball: Dr. Jordi Beneito, Jordina Grasa, Manel Bravo, Maite Merino i Mireia Udina. Especialment a la Dra. Sara Ortega per la inestimable ajuda en els inicis d'aquest projecte, i a Miriam Olid per contribuir fonamentalment en alguns dels resultats que aquí es presenten.

Per últim, el més important agraïment per la meva família i parella. Per recolzar-me i acompanyar-me durant aquesta llarga travessia i per educar-me en la humilitat, la senzillesa, l'esforç i la dedicació, com el camí per obtenir tots els somnis.

A tots, gràcies!

Índex

Agraïments

			<u>Pàgina</u>
Pref	aci		1
1.	Intro	oducció	3
	1.1.	Objectiu de la tesi i procés cronològic	3
	1.2.	Estructura del document	5
2.	Qualitat de l'aire i modelització atmosfèrica		7
	2.1.	La contaminació atmosfèrica.	7
		2.2.1. Ozó troposfèric	8
		2.2.2. Diòxid de nitrogen	11
		2.2.3. Material particulat	12
	2.2.	Marc normatiu i legislació	16
	2.3.	Característiques de la concentració de gasos i aerosols a Catalu	nya
			18
	2.4.	Modelització atmosfèrica – Estat de l'art	20
3.	Siste	ma de Modelització de la Qualitat de l'Aire	25
	3.1.	Descripció	25
	3.2.	Model Meteorològic	27
		3.2.1. MM5	27
		3.2.2. WRF	29
	3.3.	MNEQA: Model Numèric d'Emissions per la Qualitat de l'Air	e 30
	3.4.	CMAQ: Model Fotoquímic	33
		3.4.1. Mòdul d'aerosols	34
		3.4.2. Mòdul de gasos	35
	3.5.	Especificacions tècniques del sistema de modelització AQM.ca	at 37
4.	Cont	tribucions al Model Numèric d'Emissions per la Qualitat	de l'Aire
	MNI	EQA	39
	4.1.	Creació del mòdul d'aerosols	40
	4.2.	Incorporació de les emissions industrials procedents del inve	entari de la
		Generalitat de Catalunya	44
	4.3.	Incorporació de la metodologia de sobreelevació	46
	4.4.	Incorporació de la pols per erosió i resuspensió	47
	4.5.	Disgregació espacial del inventari d'emissions EMEP i metod	ologia <i>top</i> -
		down	53
5.	Siste	ma de Previsió de la Qualitat de l'Aire AOF.cat	61
-	5.1.	Processat i anàlisi de les dades generades per AOM cat	62
	5.2.	Incorporació de la correcció de la desviació model – mesura	69
	2.2.	5.2.1. Metodologies de correcció	70
	5.3.	Participació en la gestió i difusió dels resultats	74
			-

6.	Valid	acions del sistema de modelització AQM.cat i de previsió AQF.	cat
			77
	6.1.	Paràmetres estadístics	78
	6.2.	Variables meteorològiques	79
	6.3.	Ozó troposfèric	82
		6.3.1. Validació horària	84
		6.3.2. Validació dels valors màxims 1-h	94
		6.3.3. Validació dels valors màxims 8-h	101
		6.3.4. Errors sistemàtics i aleatoris	107
		6.3.5. Avaluació de la incertesa segons la Directiva Europea	108
	6.4.	Diòxid de nitrogen	109
	6.5.	Material particulat PM10	111
7.	Diagr	nòstic i anàlisi de sensibilitat del sistema AOM.cat	117
	7.1.	Incertesa de les emissions industrials	117
	7.2.	Emissions del trànsit urbà per a resolucions horitzontals de 3km	120
	7.3.	Aplicació de la disgregació espacial de les emissions EMEP	124
	7.4.	Coeficient de transport turbulent vertical	126
8	Incor	noració del model WRF al sistema AOM cat	133
0.	8 1	Anàlisi de sensibilitat de les previsions del sistema a canvi	s en els
	0.1.	esquemes de cana límit i superficial	133
		8 1 1 Sensibilitat del model WRF	135
		8.1.2 Sensibilitat del model CMAO	130
			140
9.	Conc	lusions i línies de treball de futur	155
	9.1.	Conclusions	157
	9.2.	Linies de treball de futur	158
10.	Biblic	ografia	159
AN	NEX 1:	Publicacions i activitat investigadora	A.1
		Articles, informes tècnics, participació en projectes i congressos.	
AN	NEX 2:	Articles publicats en revistes amb revisió per experts.	A.7
	A perfor forecast c	mance evaluation of the MM5/MNEQA/CMAQ air quality model in provident provided to a second the second se	0
	Numerica and land- summer 2	al experiments to determine MM5/WRF-CMAQ sensitivty to various PB -surface schemes in North-eastern Spain: application to a case study i 2009. International Journal of Environmental Pollution. In Press.	L n
	on of MM5-MNEQA-CMAQ air quality modelling system and bias nt techniques to forecast ozone concentrations: application to the north pain during summers 2009 and 2010. Acceptat per Science of the Tota pent en fase de revisió.	5- 1- 11	

ANNEX 3: Fórmules de Briggs de càlcul de la sobreelevació. A.9

Llista de figures

Capítol 2

Figura 2.1. Diagrama esquemàtic dels processos verticals de mescla dels contaminants (Finlayso	on-Pitts i
Pitts, 2000).	8
Figura 2.2. Esquema de la química de l'ozó troposfèric (Jacob, 2000).	10
Figura 2.3. Representació bidimensional i tridimensional de les isopletes d'ozó generades per la	,
combinació d'òxids de nitrogen NOx i compostos orgànics volàtils (Finlayson-Pitts i Pitts, 2000). La regió
VOCs (<i>VOC-limited</i> i D) correspon típicament a àrees urbanes i la regió NO_x (<i>NO_x-limited</i> i A)	correspon
a àrees rurals.	11
Figura 2.4. Distribució de grandària segons el número de partícules (Viana, 2003; esquerra). Dis	stribució
de grandària segons el número i la massa de les partícules (Ten Brink, 2006; dreta).	13
Figura 2.5. Esquema de la distribució de grandàries de l'aerosol atmosfèric i reaccions associado	es
(Finlayson-Pitts i Pitts, 2000).	14
Figura 2.6. Esquema resum del cicle dels aerosols a l'atmosfera (Ten Brink, 2006).	14
Figura 2.7. Zones de Qualitat de l'Aire a Catalunya.	18
Figura 2.8. Esquema gaussià per simular la dispersió d'un contaminant a l'atmosfera	
(http://www.stuffintheair.com/air-quality-dispersion-models.html).	21
Figura 2.9. Diagrama esquemàtica mostrant els elements bàsics d'un model de capsa simple (Sc	here and
Demerjian, 1978).	22
Figura 2.10. Representació esquemàtica dels models Eulerians de malla.	23

Capítol 3

igura 3.1. Esquema de funcionament del sistema de modelització de la qualitat de l'aire per Catalunya	
	26
Figura 3.2. Esquema de dominis dels models.	26
Figura 3.3. Pronòstic meteorològic, d'emissions i fotoquímic (d'esquerra a dreta respectiv	ament) exemple
d'AQM.cat.	27
Figura 3.4. Representació esquemàtica de funcionament de MM5.	28
Figura 3.5. Representació esquemàtica de funcionament de WRF-ARW.	29
Figura 3.6. Representació esquemàtica de funcionament de MNEQA.	32
Figura 3.7. Esquema de funcionament bàsic del model CMAQ.	34

Capítol 4

Figura 4.1. Xarxa de carreteres principals (blau) i secundàries (taronja) de Catalunya (en negre indicats els límits comarcals). 41

Figura 4.2. Número d'indústries comptabilitzades inicialment a MNEQAv1.0 per quadrícules de 9km (Olid, 2007b). 44

Figura 4.3. Comparació (considerant i no considerant l'alçada efectiva) de la suma de les emissionsindustrials diàries per diferents espècies contaminants i per diferents estrats. L'exemple correspon al dia 3d'agost de 2008. Estrat 1: 0-15.29m; estrat 2: 15.29-30.59m; estrat 3: 30.59-45.93m; estrat 4: 45.93-61.28m; estrat 5: 61.28-76.66m; estrat 6: 76.77-153.89m; estrat 7: 153.89-231.72m; estrat 8: 231.72-310.14m; estrat 9: alçades superiors a 310.14m.47Figura 4.4. Usos del sòl per Catalunya l'any 2002 (DMAH, 2002).50

Figura 4.4. Osos del sol per Catalulya l'any 2002 (Dividit, 2002). Figura 4.5. Emissions de PM10 corresponents al dia 20 de Maig de 2009 a les 14:00 UTC sense i amb la inclusió de la pols degut a l'erosió del sòl (superior esquerra i dreta respectivament). Immissions de PM10 del dia 20 de Maig de 2009 a les 14:00 UTC sense i amb la inclusió de pols també per efecte de l'erosió del sòl (inferior esquerra i dreta respectivament). 51

Figura 4.6. Emissió (esquerra) i immissió (dreta) del dia 20 de Maig de 2009 a les 14:00 UTC incloent la pols degut a la erosió del sòl i la resuspensió de les partícules. 52

Figura 4.7. Valor diari de PM10 per al dia 20 de Maig de 2009 per l'AQM.cat original, incloent la pols per erosió del sòl i incloent la pols per erosió més la resuspensió (d'esquerra a dreta respectivament).

53

Figura 4.8. Domini EMEP (els números als eixos indiquen els índex de cada cel·la del domini). 54

Figura 4.9. Localització de les emissions PRTR corresponents a Instal·lacions de combustió (esquerra) i a Gestió de residus (dreta). 55

Figura 4.10. Comparació del domini de 3km per a tota España (DE) amb el domini EMEP (50km) i el contorn provincial. 56

Figura 4.11. Usos del sòl CLC2000 (esquerra) i xarxa de carreteres i ferrocarrils (dreta) a España. 56

Figura 4.12. Emissions de NO anuals seguint la metodologia de disgregació amb resolució 3km. 58 Figura 4.13. Emissions horàries corresponents a l'acoblament de les metodologies *bottom-up* i *top-down* segons MNEQAv4.0 a l'àrea de Catalunya a les 12UTC del 28 de juliol de 2009. 59

Capítol 5

Figura 5.1. Esquema de funcionament del sistema de previsió de la qualitat de l'aire per Catalunya AOF.cat. 61 Figura 5.2. Sortida d'algunes de les variables meteorològiques proporcionades pel model MM5 pel dia 05 d'agost de 2009 a les 12:00 UTC per al domini D1. 65 Figura 5.3. Sortida d'algunes de les variables meteorològiques proporcionades pel model MM5 pel dia 05 d'agost de 2009 a les 12:00 UTC per al domini D2. 66 Figura 5.4. Sortida d'algunes de les variables meteorològiques proporcionades pel model MM5 pel dia 05 d'agost de 2009 a les 12:00 UTC per al domini D3. 67 Figura 5.5. Sortida de les concentracions de diverses espècies químiques proporcionades pel sistema AQM.cat. Previsió d'ozó màxim 1-h (superior esquerra) i previsió horària d'ozó a les 12:00 UTC (superior dreta) per al dia 5 d'agost de 2009. Valors màxims 1-h de PM10 i NO2 (mig dreta i inferior dreta respectivament), i valors diaris de PM10 i NO2 (mig esquerra i inferior esquerra respectivament) corresponents al dia 5 d'agost de 2009. 68 Figura 5.6. ICQA calculat segons el sistema de post-processat d'AQM.cat. 69 Figura 5.7. Evolució diària de l'ozó troposfèric pronosticat per AQM.cat envers la mesura a les estacions de la XVPCA. 69 Figura 5.8. Valors màxims d'ozó al domini D3 segons els sistemes AQM.cat (superior esquerra) i AQF.cat amb mean substraction (superior dreta), ratio adjustment (inferior esquerra) i hybrid forecast (inferior dreta) 74 Figura 5.9. Nivells d'ozó per zones de qualitat de l'aire definits en la previsió AQF.cat. 75 Figura 5.10. Nivells d'ozó pels punts de mesurament de la XVPCA definits en la previsió AQF.cat. 76 Figura 5.11. Mapa d'avisos per ozó troposfèric. 76

Capítol 6

Figura 6.1. Evolució dels errors RMSE i MB diaris per l'estiu 2009 (esquerra) i 2010 (dreta): (a) velocitat del vent mesurada a 10m; (b) direcció del vent mesurada a 10m; (c) temperatura de l'aire a 1.5m; (d) humitat específica a 1.5m. Figura 6.2. Evolució diària dels valors mitjos d'ozó previstos (MOD) pel sistema de previsió AQF.cat (incorporant les correccions MS, RA i HF), i observats (OBS) per les 51 estacions de la XVPCA considerades a la taula 6.3 pels períodes 2009 (superior) i 2010 (inferior). 84 Figura 6.3. Evolució temporal de les concentracions mitges horàries proporcionades pel sistema de previsió de la qualitat de l'aire AOF.cat i les estacions de la XVPCA per l'estiu 2009 (esquerra) i 2010 (dreta). 85 Figura 6.4. Evolució temporal de les concentracions mitges horàries proporcionades pel sistema de previsió de la qualitat de l'aire AOF.cat i les estacions de la XVPCA per l'estiu 2009. 86 Figura 6.5. Evolució temporal de les concentracions mitges horàries proporcionades pel sistema de previsió de la qualitat de l'aire AQF.cat i les estacions de la XVPCA per l'estiu 2010. 87 Figura 6.6. Histogrames de la desviació del pronòstic dels sistemes AOM.cat i AOF.cat envers les mesures corresponents al valors màxim 1-h diaris per l'estiu 2009 (esquerra) i 2010 (dreta). 100 Figura 6.7. Histogrames de la desviació del pronòstic dels sistemes AQM.cat i AQF.cat envers les mesures corresponents al valors màxim 8-h diaris per l'estiu 2009 (esquerra) i 2010 (dreta). 107 Figura 6.8. Evolució diària de les concentracions mitges de NO₂ pronosticades pel sistema AQM.cat (MOD) i de les mesures de les estacions de la XVPCA (OBS). 111

Modelització i simulació fotoquímica mesoscalar del transport del material particulat i gasos a l'atmosfera

Capítol 7

Figura 7.1. Valors diaris (superior) i màxims (inferior) del material particulat PM10 pel dia 28 de juliol de 2009, amb i sense aplicació de la metodologia de sobreelevació (esquerra i dreta respectivament).

120

Figura 7.2. Evolució diària de les concentracions mitges de NO₂ pronosticades pel sistema AQM.cat segons l'escenari base (MOD_base) i l'escenari modificat (MOD_tr_urba), i de les mesures de les estacions de la XVPCA (OBS) pel dia 28 de Juliol de 2008. 124

Figura 7.3. Valor diari de material particulat PM10 utilitzant MNEQAv3.0 (esquerra) i afegint la metodologia de disgregació espacial EMEP de MNEQAv4.0 dels sectors que la metodologia *bottom-up* no incorpora (dreta). 126

Figura 7.4. Proporció d'àrea urbana per cada cel·la del domini D3 segons MCIPv3.0.128Figura 7.5. Evolució diària de les concentracions mitges de O3 pronosticades pel sistema AQM.cat segons1'escenari base (MOD_base) i l'escenari modificat (MOD_kzmin_purb), i de les mesures de les estacionsde la XVPCA pel dia 28 de Juliol de 2008.129

Figura 7.6. Evolució diària de les concentracions mitges de NO₂ pronosticades pel sistema AQM.cat segons l'escenari base (MOD_base) i l'escenari modificat (MOD_kzmin_purb), i de les mesures de les estacions de la XVPCA (OBS) pel dia 28 de Juliol de 2009. 130

Figura 7.7. Evolució diària de les concentracions mitges de NO₂ pronosticades pel sistema AQM.cat segons l'escenari base (MOD_base) i l'escenari modificat (MOD_kzmin_purb), i de les mesures de les estacions de la XVPCA (OBS) pel dia 28 de Juliol de 2009. 130

Capítol 8

Figura 8.1. Evolució diària de la temperatura a 2m (a i b), la velocitat del vent (c i d) i la humitat específica (e i f) pels dies 28 de juliol (esquerra) i 6 d'agost (dreta) de 2009. 139

Figura 8.2. Temperatura a 2m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 28 de juliol de 2009 a les 12UTC. 141

Figura 8.3. Vent a 10m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 28 de juliol de 2009 a les 12UTC. 142

Figura 8.4. Humitat relativa a 2m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 28 de juliol de 2009 a les 12UTC. 143

Figura 8.5. Temperatura a 2m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 6 d'agost de 2009 a les 12UTC. 144

Figura 8.6. Vent a 10m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 6 d'agost de 2009 a les 12UTC. 145

Figura 8.7. Humitat relativa a 2m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 6 d'agost de 2009 a les 12UTC. 146

Figura 8.8. Evolució diària de l'alçada de la capa límit segons els diferents experiments pels dies 28 de juliol (superior) i06 d'agost (inferior) de 2009. 147

Figura 8.9. Comparació de la coberta nuvolosa (%) pronosticada per MM5-MRF (esquerra) i WRF-YSU (dreta) pels dies 28 de juliol (superior) i 6 d'agost (inferior) de 2009 a les 12UTC. 148

Figura 8.10. Distribució dels valors màxims 1-h de la concentració d'ozó pel 28 de juliol de 2009 previstos pel sistema AQM.cat utilitzant com a model meteorològic MM5-MRF i les diferents configuracions WRF. 151

Figura 8.11. Distribució dels valors màxims 1-h de la concentració d'ozó pel 06 d'agost de 2009 previstos pel sistema AQM.cat utilitzant com a model meteorològic MM5-MRF i les diferents configuracions WRF. 153

Llista de taules

Capítol 2

 Taula 2.1. Valors límits per a la protecció de la salut humana de NO2 i PM10 i llindars d'informació i alerta per l'ozó segons la Directiva Europea 2008/50/CE.
 16

 Taula 2.2. Incertesa de la modelització per a diferents contaminants atmosfèrics segons la Directiva Europea EC/2008/50. Es diferencia entre "--" i "sense definir de moment": en el primer cas no hi ha una definició i en el segon cas encara no s'ha realitzar aquesta definició però s'espera incorporar en les següents versions de la Directiva.
 17

 Taula 2.3. Superacions del llindar d'informació d'ozó troposfèric mesurats des de 1994 fins a l'actualitat.
 19

Capítol 3

Taula 3.1. Característiques específiques del sistema de modelització AQM.cat	26
Taula 3.2. Opcions físiques dels models meteorològics MM5 i WRF utilitzades.	27
Taula 3.3. Espècies d'aerosol obtingudes amb el model CMAQv4.6 amb el mòdul AERO4 act	tivat.
Unitats: massa [µg m ⁻³] i número [m ⁻³].	35
Taula 3.4 Espècies de gasos obtingudes amb el model CMAQv4.6 amb el mòdul CBM-V activ	vat.
	36

<u>Capítol 4</u>

Taula 4.1. Evolució del model d'emissions MNEQA i contribucions del doctorand.	39
Taula 4.2. Factors d'emissió degut a la combustió de diferents vehicles dièsel i directives.	42
Taula 4.3. Factors d'emissió per a les emissions de l'agricultura	43
Taula 4.4. Factors d'emissió de partícules en funció del combustible fòssil utilitzat (font: EPA).	43
Taula 4.5. Valors de CO, NO_x i VOCs per un dia laborable per Catalunya.	45
Taula 4.6. Model conceptual del procediment de disgregació de les emissions EMEP/CORINAI	R.
	55
Taula 4.7. Model conceptual del procediment de disgregació de les emissions EMEP/CORINAI	R en el
cas de les emissions per fonts no puntuals.	57
Taula 4.8. Error de la metodologia de disgregació.	58
Taula 4.9. Sectors EMEP/CORINAIR acoblats a les emissions del domini D3 segons els diferen	ts
contaminants seleccionats.	59

<u>Capítol 5</u>

Taula 5.1. Característiques del tipus de valor previst per cada espècie de contaminant.	63
Taula 5.2. Relació dels nivells d'immissió i l'Índex Català de la Qualitat de l'Aire ICQA.	64

<u>Capítol 6</u>

Taula 6.1. Definició dels diferents paràmetres estadístics utilitzats en l'avaluació del sistema de modelització AQM.cat i de previsió AQF.cat. M és el valor pronosticat i O el valor mesurat. 78 Taula 6.2. Resultats dels paràmetres estadístics corresponents a l'avaluació del model meteorològic MM5 per tot el període a estudi. 80 Taula 6.3. Localització de les estacions de mesura de la XVPCA utilitzades en la validació de l'ozó troposfèric i promig per tot el període dels valors modelitzats i observats. 83 Taula 6.4. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors horaris d'AQM.cat i AQF,cat i de les mesures a les estacions de la XVPCA. S'han filtrat els valors observats inferiors a 60µgm⁻³. 88 Taula 6.5. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors horaris del sistema AQM.cat (utilitzant un filtre de $60\mu gm^{-3}$) i de les mesures a les estacions XVPCA. 90 Taula 6.6. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors horaris del sistema AQF.cat amb correcció MS (utilitzant un filtre de 60μ gm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 91 Taula 6.7. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors horaris del sistema AQF.cat amb correcció RA (utilitzant un filtre de 60μ gm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 92

Modelització i simulació fotoquímica mesoscalar del transport del material particulat i gasos a l'atmosfera

Taula 6.8. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors horaris del sistema AQF.cat amb correcció HF (utilitzant un filtre de $60\mu gm^{-3}$) i de les mesures a les estacions XVPCA. 93 Taula 6.9. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 1-h d'AQM.cat i AQF.cat i de les mesures a les estacions de la XVPCA. S'han filtrat els valors observats inferiors a $60 \mu \text{gm}^{-3}$ 94 Taula 6.10. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 1-h del sistema AQM.cat (utilitzant un filtre de 60μ gm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 96 Taula 6.11. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 1-h del sistema AQF.cat amb correcció MS (utilitzant un filtre de 60µgm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 97 Taula 6.12. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 1-h del sistema AQF.cat amb correcció RA (utilitzant un filtre de 60µgm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 98 Taula 6.13. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 1-h del sistema AQF.cat amb correcció HF (utilitzant un filtre de 60µgm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 99 Taula 6.14. Amplada i desplaçament de l'ajust Gaussià calculat sobre la distribució de desviacions dels valors màxims 1-h pronosticats pel sistema de previsió de qualitat de l'aire. 100 Taula 6.15. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 8-h d'AQM.cat i AQF.cat i de les mesures a les estacions de la XVPCA. S'han filtrat els valors observats inferiors a 60µgm⁻³. 101 Taula 6.16. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 8-h del sistema AQM.cat (utilitzant un filtre de 60µgm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 103 Taula 6.17. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 8-h del sistema AOF.cat amb correcció MS (utilitzant un filtre de 60µgm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 104 Taula 6.18. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 8-h del sistema AQF.cat amb correcció RA (utilitzant un filtre de 60µgm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 105 Taula 6.19. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 8-h del sistema AQF.cat amb correcció HF (utilitzant un filtre de 60µgm⁻³) i de les mesures a les estacions XVPCA. 106 Taula 6.20. Amplada i desplaçament de l'ajust Gaussià calculat sobre la distribució de desviacions dels valors màxims 8-h pronosticats pel sistema de previsió de qualitat de l'aire. 107 Taula 6.21. Errors sistemàtics i aleatoris calculats pels valors màxims 1-h i 8-h d'ozó troposfèric 108 Taula 6.22. Valors de MRDE calculats pels pronòstics del sistema de modelització i previsió. 109 Taula 6.23. Comparació entre el promig dels valors mesurats i els modelitzats amb AQM.cat per les diferents estacions de la XVPCA. 110 Taula 6.24. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors màxims 1-h del sistema AQM.cat i de les mesures a les estacions XVPCA 111 Taula 6.25. Comparació dels valors diaris previstos per AQM.cat en funció dels diferents promitjos per a diferents intervals horaris (d: dia de mesura i d+1: dia següent). 112 Taula 6.26. Comparació entre el promig dels valors diaris modelitzats amb AQM.cat i els mesurats per les diferents estacions de la XVPCA. 113 Taula 6.27. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors mitjos diaris del sistema AQM.cat i de les mesures a les estacions de la XVPCA. 114

Taula 6.28. Paràmetres estadístics calculats a partir dels valors mitjos diaris del sistema AQM.cat i de lesmesures a diferents estacions de la XVPCA114

Capítol 7

Taula 7.1. MNBE i MNGE diari del període que satisfà les restriccions EPA (1991) segons els valors horaris, màxims 1-h i màxims 8-h i escollit per avaluar les modificacions sobre el sistema AQM.cat.

117

Taula 7.2. Emissions industrials de MNEQAv3.0 que generen concentracions no realistes segons elsistema AQM.cat.

Taula 7.3. Emissió de diòxid de sofre de la central tèrmica de Cercs per a diverses dates de declaració. 118

Taula 7.4. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE per l'ozó troposfèric del dia 28 dejuliol de 2009 amb i sense aplicació de la sobreelevació.119

Taula 7.5. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE pel diòxid de nitrogen del dia 28 dejuliol de 2009 amb i sense aplicació de la sobreelevació.119

Taula 7.6. Ciutats sobre les que s'aplica l'anàlisi objectiu, fracció de reducció respecte les emissions deBarcelona i criteri d'elecció.122

Taula 7.7. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE per l'ozó troposfèric del dia 28 dejuliol de 2009 amb i sense aplicació de la nova metodologia de càlcul del trànsit urbà.123

Taula 7.8. Valors mesurats i previstos d'ozó troposfèric màxims 1-h, per l'escenari base i l'escenari aplicant nova metodologia del trànsit urbà, que superen el llindar d'informació (180µgm⁻³) a la zona de qualitat de l'aire de la Plana de Vic. 123 Taula 7.9. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE pel diòxid de nitrogen del dia 28 de juliol de 2009 amb i sense aplicació de la nova metodologia de càlcul del trànsit urbà. 123 Taula 7.10. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE pel material particulat PM10 del dia 28 de juliol de 2009 amb i sense aplicació de la nova metodologia de càlcul del trànsit urbà. 124 Taula 7.11. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE per l'ozó troposfèric del dia 28 de juliol de 2009 amb i sense aplicació de la nova metodologia d'incorporació de la disgregació espacial EMEP. 125 Taula 7.12. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE pel diòxid de nitrogen del dia 28 de juliol de 2009 amb i sense aplicació de la nova metodologia d'incorporació de la disgregació espacial EMEP. 125 Taula 7.13. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE pel material particulat PM10 del dia 28 de juliol de 2009 amb i sense aplicació de la nova metodologia d'incorporació de la disgregació espacial EMEP. 125 Taula 7.14. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE per l'ozó troposfèric del dia 28 de juliol de 2009 amb i sense aplicació del coeficient de dispersió turbulenta depenent de la fracció urbana. Taula 7.15. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE pel diòxid de nitrogen del dia 28 de juliol de 2009 amb i sense aplicació del coeficient de dispersió turbulenta depenent de la fracció urbana. 130 Taula 7.16. Comparació dels paràmetres estadístics MNBE i MNGE pel material particulat PM10 del dia 28 de juliol de 2009 amb i sense aplicació del coeficient de dispersió turbulenta depenent de la fracció urbana. 131 **Capítol 8** Taula 8.1. Opcions físiques dels models meteorològics MM5 i WRF utilitzades. 134 Taula 8.2. Valors dels estadístics corresponents a l'avaluació del model MM5 i les diferents

Taula 8.2. Valors dels estadístics corresponents a l'avaluació del model MM5 i les diferentsconfiguracions del model WRF pel 28 de juliol de 2009.137Taula 8.3. Valors dels estadístics corresponents a l'avaluació dels models MM5 i les diferents137configuracions del model WRF pel 6 d'agost de 2009.137Taula 8.4. Comparació entre les emissions biogèniques de NOx i VOCs calculades mitjançant el pronòstic149Taula 8.5. Valors del estadístics corresponents a les avaluacions dels sistemes MM5-CMAQ i WRF-149CMAQ per la previsió de la concentració d'ozó del dia 28 de juliol de 2009.150Taula 8.6. Valors del estadístics corresponents a les avaluacions dels sistemes MM5-CMAQ i WRF-150CMAQ per la previsió de la concentració d'ozó del dia 6 d'agost de 2009.150