



# 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**



## **8. Incorporació del model WRF al sistema AQM.cat**

Durant la última fase de recerca, el doctorand s'ha centrat en l'estudi, execució i incorporació al sistema de modelització AQM.cat del model meteorològic WRF (secció 3.2). La raó és que tot i que el model meteorològic MM5, utilitzat pels pronòstics operatius presentats en aquesta tesi, és un dels models més utilitzats per la comunitat científica i que permet proporcionar les dades meteorològiques a un model fotoquímic com el CMAQ, des de fa uns anys no es realitzen actualitzacions sobre ell i el seu ús s'ha anat substituint per el del model WRF. Aquest model presenta millores en quant a les parametritzacions dels processos físics involucrats i suposa una millora respecte de les últimes versions del model MM5.

Així, amb la finalitat d'acoblar el model WRF al pronòstic operatiu de la qualitat de l'aire, el doctorand ha avaluat la bondat de la utilització d'aquest model envers MM5. S'ha de tenir en compte que els camps meteorològics són una de les entrades fonamentals dels models fotoquímics ja que poden afectar al pronòstic de la concentració dels contaminants considerats, a la producció d'espècies secundàries (Minguzzi et al., 2005) i a la distribució geogràfica dels màxims d'ozó (Pirovano et al., 2007).

Per aquest motiu en aquest capítol es presenta un estudi de la sensibilitat del model WRF, respecte als diferents esquemes de capa límit atmosfèrica (PBL) i de capa superficial per simular la dinàmica i la termodinàmica d'aquesta capa. A més, tot i que s'han realitzat diferents estudis de sensibilitat pel model WRF en quant a diferents esquemes de capa límit (Berg i Zhong, 2005; Borge et al., 2008; Bright i Mullen, 2002; Mao et al., 2006; Pérez et al., 2006; Vila-Guerau de Arellano et al., 2001; Zhang i Zheng, 2004), fent posteriorment l'anàlisi de la influència de les entrades meteorològiques a diferents models fotoquímics (de Meij et al., 2009; Minguzzi et al., 2005; Pirovano et al., 2007; Smyth et al., 2006; Soong et al., 2006; Zhang et al., 2006b), hi han realment pocs estudis fets específicament sobre el model fotoquímic CMAQ (Appel et al., 2009).

Aquest capítol dona doncs resposta a aquesta temàtica i al punt (7) del procés cronològic de la recerca del doctorand presentat al capítol 1.

### **8.1. Anàlisi de sensibilitat de les previsions del sistema a canvis en els esquemes de capa límit i superficial.**

En aquest estudi s'analitza i es comparen els resultats dels pronòstics del model CMAQ, quan es substitueix el model MM5v3.7 pel model WRF-ARWv3.1.1 dins del sistema AQM.cat, utilitzant diferents parametritzacions de capa límit atmosfèrica i de sòl<sup>17</sup>. A la taula 8.1 es presenten els diferents esquemes utilitzats dins del model WRF i que corresponen als diferents experiments realitzats<sup>18</sup>. El primer experiment es basa en comparar les observacions amb els resultats de la simulació utilitzant la configuració de MM5 utilitzada dins de AQM.cat, mentre que la resta d'experiments comparen els

---

<sup>17</sup> S'ha intentat aïllar l'esquema de capa límit però com que cadascun d'ells requereix d'un esquema específic de capa superficial, la sensibilitat del model correspon a l'esquema de PBL i el de sòl associat.

<sup>18</sup> Coincident amb la taula 3.2 i reproduïda novament per una major facilitat de lectura.

resultats de les simulacions utilitzant diferents esquemes de PBL i de capa superficial amb el model WRF, mantenint constants les parametritzacions de cúmuls, microfísica, radiació i sòl. Tot i que existeixen diferències entre els esquemes de cúmuls, microfísica i radiació entre MM5 i WRF, s'ha intentat utilitzar a WRF esquemes d'aquestes opcions físiques que fossin el més semblants possibles als utilitzats a MM5.

Taula 8.1. Opcions físiques dels models meteorològics MM5 i WRF utilitzades.

Opcions físiques	MM5 operatiu	Configuracions WRF	
Cumulus	Grell (Grell., 1993)	Grell 3D (Grell i Debenyi, 2002)	
Esquema PBL	Medium Range Forecast Model (MRF; Hong i Pan, 1996)	WRF-1: Yonsei University (YSU; Hong et al., 2006)	WRF-2: Mellor-Yamada-Janjic (MYJ; Janjic, 2002)
		WRF-3: Asymmetrical Convective Model 2 (ACM2, Pleim, 2007a,b)	WRF-4: Quasi-Normal Scale Elimination (QNSE; Sukoriansky et al., 2006)
Microfísica	Schultz (Schultz, P., 1995)	Lin (Chen i Sun, 2002)	
Esquema radiació	RRTM lw (Mlawer et al., 1997) & Cloud-radiation sw (Dudhia, 1989)	RRTM lw (Mlawer et al., 1997) & RRTMG sw (Chou i Suarez, 1994)	
Esquema de sòl	Noah LSM (Chen i Dudhia, 2001)	Noah LSM (Chen i Dudhia, 2001)	
Esquema superficial	MM5 similarity (Paulson, 1970; Dyer i Hicks, 1970; Webb, 1970)	WRF-1: MM5 similarity (Skamarock et al., 2005)	WRF-2: Eta similarity (Janjic, 2002)
		WRF-3: Pleim-Xiu (Xiu i Pleim, 2001)	WRF4: QNSE (Sukoriansky, et al., 2005)

A continuació es descriuen breument cadascun dels quatre esquemes de PBL utilitzats per WRF:

- L'esquema de capa límit de la Universitat de Yonsei (YSU) (Hong et al., 2006). Es tracta d'una modificació de l'esquema de Medium Range Forecast (MRF) (Hong i Pan, 1996) utilitzat en les simulacions realitzades amb MM5 i creat per tal de reduir la sobreestimació de la mescla, incloure fluxos específics d'*entrainment* i diferents especificacions de l'alçada de la capa límit. L'esquema YSU incorpora un tractament explícit de la zona de *entrainment* al cim de la capa límit, de forma que aquest *entrainment* és proporcional al flux de calor superficial (Noh et al., 2003). Per altre banda l'alçada de la capa límit a YSU es determina utilitzant la definició del número de Richardson de *bulk* crític ( $Rib_{cr}$ ). En el nou esquema aquest valor és 0 mentre que en el cas del MRF la definició de l'alçada de la capa límit es realitza amb  $Rib_{cr}$  igual a 0.5. Aquest fet provoca que l'esquema YSU envers MRF incrementi la mescla a la capa límit sota règims de convecció lliure induïda tèrmicament, i redueixi la mescla sota règims de convecció forçada induïts mecànicament (Hong et al., 2006). D'aquesta manera millora el problema habitual del esquema MRF de la sobreestimació de la mescla en presència de vents intensos. L'esquema de capa superficial utilitzat per YSU és el de MM5 similarity (Skamarock et al., 2005)
- Mellor-Yamada-Janjic (MYJ; Janjic, 2002). És tracta d'un esquema de parametrització de la turbulència que sorgeix com la evolució de l'esquema de Mellor-Yamada (1982) d'ordre 2.5. Es caracteritza per incorporar l'equació de pronòstic de la energia cinètica turbulenta (TKE). Aquesta parametrització abasta una ampla gama de règims turbulents de la capa límit, per lo qual incorpora una longitud de mescla ( $l$ ) que depèn de la TKE, de la flotabilitat i de la cisalla del flux. Similarment, l'alçada de la capa límit a MYJ es calcula a partir de la TKE. Per utilitza aquest esquema es necessari complementar-lo amb el esquema de capa superficial de Eta similarity (Janjic, 2002).

- Asymmetrical Convective Model version 2 (ACM2) (Pleim, J.E., 2007a, 2007b). Inclou un esquema no local ja present al model MM5 (ACM), que es tracta d'un model transilient no local resultant de la modificació de l'esquema Blackadar, combinat amb un model de *eddy diffusion*. D'aquesta manera ACM2 pot representar les components del transport turbulent local i no local. L'esquema de capa superficial utilitzat per ACM2 és el de Pleim-Xiu (Xiu i Pleim, 2001).
- Quasi-Normal Scale Elimination (QNSE) (Sukoriansky et al., 2006). La parametrització de la turbulència sota condicions de forta estabilitat és una de les tasques més difícils de representar en els models numèrics. QNSE ha estat desenvolupat per tenir en compte especialment la turbulència en aquestes condicions que és anisòtropa i també la possible generació d'ones internes. Així, aquest esquema permet predir alguns fluxos que no ho són utilitzant altres esquemes. Sota règims d'inestabilitat QNSE proporciona resultats semblants a MYJ, mentre que per règims molt estables, l'esquema permet valors de energia cinètica turbulenta TKE de l'ordre de  $0.01 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$ . L'esquema de capa superficial utilitzat per l'esquema QNSE també s'anomena esquema QNSE (Sukoriansky et al., 2005)

El conjunt de processos que tenen lloc a la capa límit i a la capa superficial són directament influenciats per les característiques de la superfície. Els esquemes o models de sòl (LSM) utilitzen informació atmosfèrica de l'esquema de capa superficial, el forçament radiatiu de l'esquema de radiació, precipitació forçada de la microfísica i esquemes convectius, conjuntament amb la informació interna de les variables d'estat y característiques de la superfície terrestre, amb la finalitat de proporcionar fluxos de calor i humitat sobre cada punt del domini. A la vegada aquest fluxos proporcionen les condicions necessàries pel transport vertical als esquemes de PBL. Els models de sòl tenen diferents graus de complexitat i les diferents configuracions del model WRF utilitzades en aquest estudi s'han utilitzat treballant amb l'esquema Noah LSM (Chen and Dudhia, 2001). Aquest esquema és el successor del model OSU desenvolupat en conjunt per NCAR i NCEP. És un esquema complex que correspon a un model de 4 capes on es pronostica la humitat i la temperatura per cada capa. A més inclou la humitat de les fulles i la predicció de la cobertura de neu i gel. Inclou també la evapotranspiració, zones de les arrels de les plantes, el drenatge del sòl i la escorrentia, tenint en compte: la categoria de la vegetació, la fracció de vegetació mensual i el tipus de sòl. L'esquema proporciona els fluxos de calor sensible i calor latent a l'esquema de capa superficial.

Tots dos models meteorològics s'han executat amb aniuament en dues direccions sobre els tres dominis de simulació presentats a la figura 3.2. La resolució vertical ha estat de 31 nivells verticals per tots els dominis. S'ha considerat una major resolució vertical als nivells inferiors (Zhang et al., 2006; Bravo et al., 2008), situant el nivell inferior a 15m sobre el terra, 21 nivells per sota de 1.5km i un nivell superior a 100hPa. Com a condicions inicials de contorn s'han utilitzat les dades del reanàlisi del *European Centre of Medium-range Weather Forecast* (ECMWF) amb resolució espacial de  $1.5^\circ \times 1.5^\circ$  i temporal de 6h. S'utilitza el Meteorology-Chemistry Interface Processor (MCIP; Byun et al., 1999) en la versió 3.4.1 per adaptar les simulacions meteorològiques de MM5 i WRF al posterior tractament fotoquímic de CMAQ.

Per avaluar el canvi entre els resultats dels diferents experiments, s'han escollit dues situacions amb alts nivells de concentració d'ozó a Catalunya durant l'any 2009, corresponents als períodes 27 i 28 de juliol, i 5 i 6 d'agost. Tots dos períodes representen les típiques condicions d'estiu a l'àrea de Catalunya, caracteritzades per una situació anticiclònica amb dèbils gradients de pressió que afavoreixen el desenvolupament de circulacions de mesoscala com la brisa de mar. Aquesta circulació d'origen tèrmic provoca el transport de contaminants des de les zones costeres, on es troben la majoria de focus emissors, cap a àrees allunyades de la seva font, deteriorant la qualitat de l'aire en aquestes zones (Soler et al., 2011).

En concret, el primer episodi està centrat en el mes de juliol de 2009, tèrmicament força càlid. Durant els dies anteriors a l'episodi la configuració sinòptica venia marcada per una baixa al sud-oest de les illes Britàniques que impulsava vent del sud-oest sobre Catalunya, el qual arrossegava una massa d'aire càlid procedent del continent Africà. La evolució de la situació mostra que el dia 23 va girar a component oest, canalitzat entre la baixa que es va traslladar al nord de les illes Britàniques i una alta que s'ubicà al nord d'Àfrica, cosa que va provocar un ascens tèrmic al litoral i Prelitoral degut al ponent rescalfat després de passar per la península Ibèrica i responsable d'impedir l'entrada de la marinada. L'absència de nuvolositat i les temperatures altes continuades amb màximes entre els 25 i 35°C, van col·laborar en la formació d'ozó, causant diverses superacions del llindar d'informació a la població i del valor objectiu 8-horari durant el període a estudi i els dies previs.

Pel que respecte al segon episodi, s'observa un augment moderat de les temperatures respecte els dies anteriors. Entre els dies 4 i 6, la configuració sinòptica va estar dominada per una baixa ubicada a les illes Britàniques, si bé Catalunya va quedar afectada en alçada per una cresta anticiclònica, amb un lleuger flux de component sud en alçada, la qual cosa va produir un breu episodi de calor. L'absència de nuvolositat i les temperatures altes amb màximes entre els 27 i 35°C, van col·laborar en la formació d'ozó, causant diverses superacions del valor objectiu 8-horari. No es van produir superacions del llindar d'informació perquè s'ha de tenir en compte que durant els dies previs la situació va estar marcada per xàfecs generalitzats, amb una baixa ubicada a les illes Britàniques i Catalunya sobre la influència d'un solc que afavoria la convecció i la formació de xàfecs i tempestes.

De forma similar al procediment realitzat als capítols 6 i 7, l'avaluació dels diferents experiments es realitza mitjançant l'aplicació dels diferents paràmetres estadístics presentats a la taula 6.1 i l'estudi es centra en el pronòstic de diferents variables meteorològiques i de l'ozó troposfèric.

#### 8.1.1. Sensibilitat del model WRF

A les taules 8.2 i 8.3 es presenten els valors dels estadístics corresponents als dos períodes analitzats pel que respecta a les variables meteorològiques.

Taula 8.2. Valors dels estadístics corresponents a l'avaluació del model MM5 i les diferents configuracions del model WRF pel 28 de juliol de 2009.

Variables Meteorològiques	Estadístic	MM5 MRF	WRF-1 YSU	WRF-2 MYJ	WRF-3 ACM2	WRF-4 QNSE
Velocitat del vent	RMSE (ms <sup>-1</sup> )	1.73	1.60	1.86	1.61	1.84
	MB (ms <sup>-1</sup> )	0.60	0.53	0.94	0.59	0.97
	IOA	0.64	0.70	0.66	0.67	0.66
Direcció del vent	MAGE (°)	56.43	58.28	57.55	61.58	60.03
	MB (°)	4.21	5.50	1.03	7.25	3.35
Temperatura	MAGE (K)	2.10	1.88	1.75	1.68	1.83
	MB (K)	-1.83	-0.77	-0.95	-0.94	-1.13
	IOA	0.89	0.90	0.91	0.93	0.91
Humitat específica	MAGE (g kg <sup>-1</sup> )	1.78	1.58	1.79	1.74	1.74
	MB (g kg <sup>-1</sup> )	1.24	0.60	0.50	0.84	0.48
	IOA	0.41	0.46	0.29	0.35	0.31

Taula 8.3. Valors dels estadístics corresponents a l'avaluació dels models MM5 i les diferents configuracions del model WRF pel 6 d'agost de 2009.

Variables Meteorològiques	Estadístic	MM5 MRF	WRF-1 YSU	WRF-2 MYJ	WRF-3 ACM2	WRF-4 QNSE
Velocitat del vent	RMSE (ms <sup>-1</sup> )	1.63	2.03	2.60	2.10	2.57
	MB (ms <sup>-1</sup> )	0.64	1.23	1.85	1.33	1.81
	IOA	0.65	0.60	0.47	0.56	0.48
Direcció del vent	MAGE (°)	50.63	54.94	56.84	53.27	57.36
	MB (°)	11.38	15.00	16.22	19.68	20.41
Temperatura	MAGE (K)	1.61	2.19	2.41	2.70	2.48
	MB (K)	-1.28	-1.24	-1.40	-1.56	-1.64
	IOA	0.95	0.91	0.90	0.90	0.89
Humitat específica	MAGE (g kg <sup>-1</sup> )	1.80	2.05	2.05	1.95	2.05
	MB (g kg <sup>-1</sup> )	1.11	0.40	-0.16	0.17	-0.34
	IOA	0.70	0.70	0.71	0.72	0.70

Per la simulació del dia 28 de juliol de 2009 els valors dels estadístics presentats a la taula 8.2 mostren que el MB de la velocitat del vent és sempre positiu, i que per tant existeix certa sobreestimació. Els esquemes YSU i ACM2 són els esquemes que millors resultats proporcionen de MB, RMSE i IOA; i QNSE és l'esquema que pitjors resultats indica. En el cas de la direcció del vent, MYJ minimitza el MAGE i ACM2 el maximitza. Similarment als resultats presentats en el capítol 6 per MM5 la baixa fiabilitat trobada per a aquesta variable es podria atribuir a la topografia complexa de l'àrea a estudi. Per a la temperatura de l'aire, els cinc experiments subestimen aquesta variable. Els millors resultats es troben amb l'esquema YSU mentre que els pitjors són els deguts a MRF amb MM5. Finalment, per a la humitat específica, el millor MAGE correspon a l'esquema YSU, mentre que MRF proporciona els pitjors resultats. Tots els experiments proporcionen un IOA baix per a la humitat específica i un IOA alt per a la temperatura. Els resultats estan en concordança amb els trobats per Borge et al. (2008) per la Península Ibèrica. Es pot concloure que per aquesta simulació el model WRF pronostica millor els valors de temperatura, vent i humitat específica que MM5 amb MRF.

Pel que respecta a la simulació corresponent al dia 6 d'agost de 2009, els estadístics presentats a la taula 8.3 mostren MB positius per a la velocitat del vent, mostrant novament una sobreestimació d'aquesta. L'esquema MYJ és el que proporciona pitjors resultats de MB mentre que MRF i YSU proporcionen els millors de MB, RMSE i IOA. Sobre la direcció del vent, l'esquema MRF de MM5 proporciona els millors resultats mentre que novament QNSE proporciona els pitjors. Per a la temperatura es reproduïx

el comportament negatiu de MB de l'anterior simulació, obtenint els millors resultats de MAGE amb MRF i els pitjors amb ACM2. Finalment, per a la humitat específica, el millor MAGE és per a l'esquema MRF, mentre que l'esquema QNSE presenta el pitjor. Les velocitats del vent i les direccions del vent previstes per MM5-MRF reproduïen millor el camp de vents que no les corresponents a WRF per a totes les configuracions. En general, les configuracions de WRF simulen velocitats del vent més altes que les corresponents a MM5-MRF i patrons circulatoris lleugerament diferents. El model WRF amb les diferents configuracions pronostica humitats específiques més baixes que el model MM5-MRF. Aquest fet implica que MM5-MRF donarà valors més alts de deposició humida que no el model WRF. Per la temperatura de l'aire i la radiació solar, els pronòstics de les diferents configuracions WRF obtenen valors més alts d'aquestes variables que la donada per MM5, el que suggereix una inferior quantitat de coberta nuvolosa en WRF respecte a MM5.

A la figura 8.1 es presenten les evolucions diàries de les variables meteorològiques temperatura, velocitat del vent i humitat específica per als dos períodes de simulació. S'observa com pel que respecta a la temperatura màxima, la configuració WRF-ACM2 és la que més s'ajusta tot i que subestima la temperatura mínima en 3°C durant la nit de l'episodi d'agost. Pel que respecta al vent es torna a verificar com WRF el sobreestima de forma generalitzada durant tot el dia. Per últim, en referència a la humitat específica s'observa una tendència a la sobreestimació més evident en MM5-MRF que en les configuracions WRF que proporcionen resultats semblants.



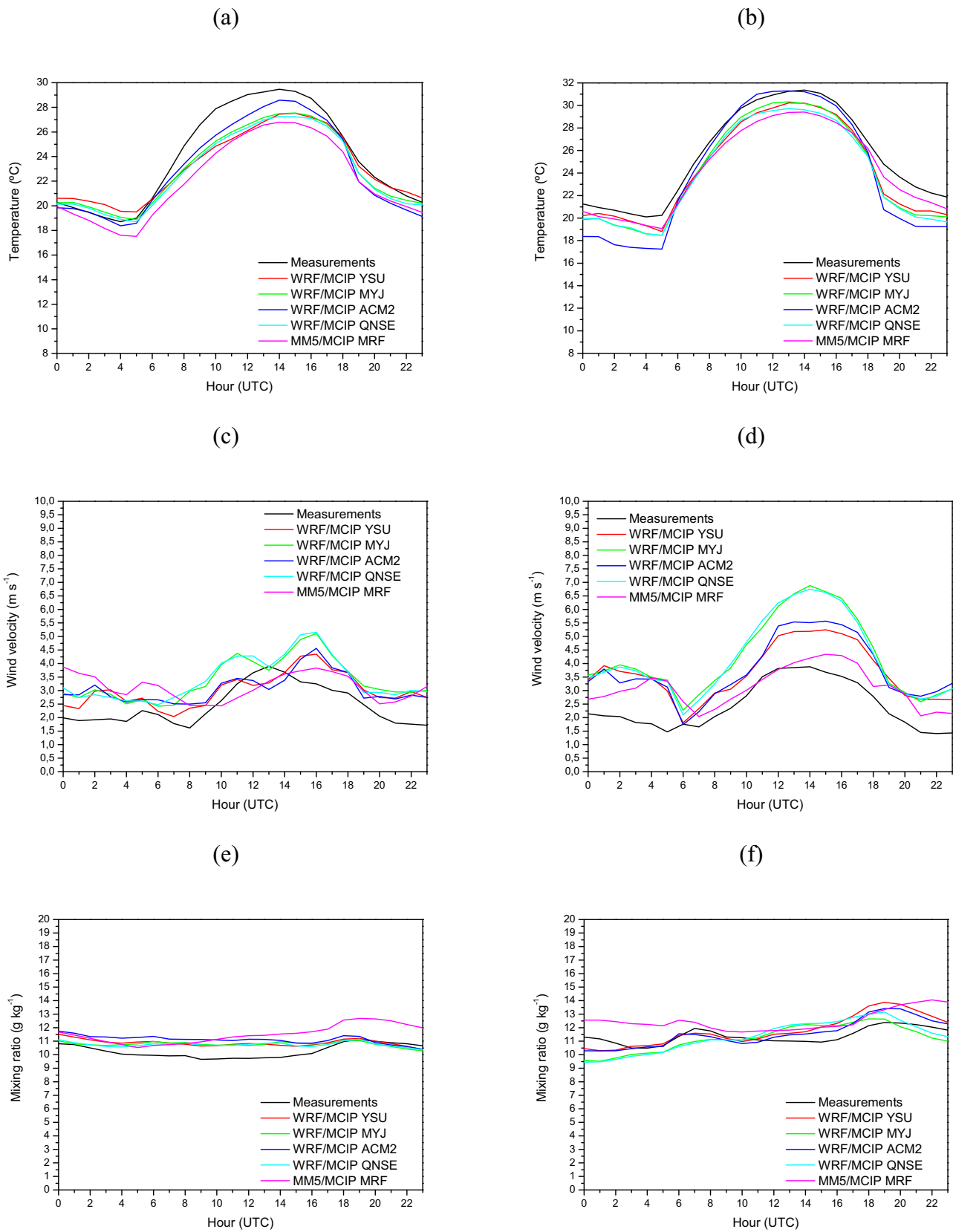


Figura 8.1. Evolució diària de la temperatura a 2m (a i b), la velocitat del vent (c i d) i la humitat específica (e i f) pels dies 28 de juliol (esquerra) i 6 d'agost (dreta) de 2009.

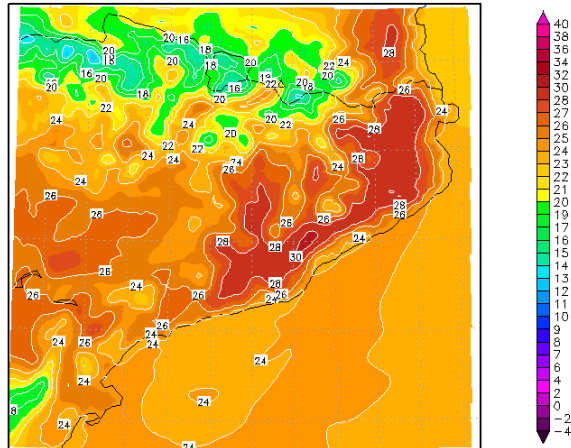
A les figures 8.2, 8.3, 8.4, 8.5, 8.6 i 8.7 es mostren les diferències entre els valors de temperatura, velocitat i direcció del vent, i humitat relativa pronosticats per MM5-MRF i les diferents configuracions WRF considerades per tot el domini D3. Per la importància que tenen sobre la previsió dels nivells d'ozó troposfèric previstos pel model fotoquímic, les diferències de temperatura i patrons de circulació presenten especial rellevància. En el primer cas pel paper que té la temperatura com accelerador de les reaccions de formació d'ozó i en el segon cas per la participació en el transport de precursors d'ozó.

Així, s'observa en la figura 8.2 clarament un augment de les temperatures en qualsevol configuració WRF envers MM5, especialment important a l'oest del domini; i sent la configuració ACM2 la que valors més alts proporciona.

En el cas de la direcció del vent, s'observen diferències en els patrons circulatoris pronosticats per ambdós models i en la intensitat del vent. Com hem comentat amb anterioritat les simulacions WRF pronostiquen vents més intensos que MM5-MRF, sent el pronòstic més similar en el cas de la comparació MM5-MRF i WRF-YSU. Aquesta tendència de WRF a preveure brises de mar durant les hores diürnes més intenses que les que pronostica MM5-MRF influeix directament en la distribució de contaminants pronosticats pel model CMAQ. A més, segons l'evolució del camp de vents, s'observen clarament diferències en els patrons circulatoris. Per exemple, en el cas de l'episodi del 28 de juliol de 2009, s'observa com durant les hores nocturnes MM5-MRF simula una recirculació centrada en l'àrea metropolitana de Barcelona que les configuracions WRF no reproduïxen o no tenen un sentit tan clar. Les implicacions que aquestes dues característiques tenen sobre els nivells màxims d'ozó previstos per cadascun dels experiments es podran visualitzar en la següent secció.

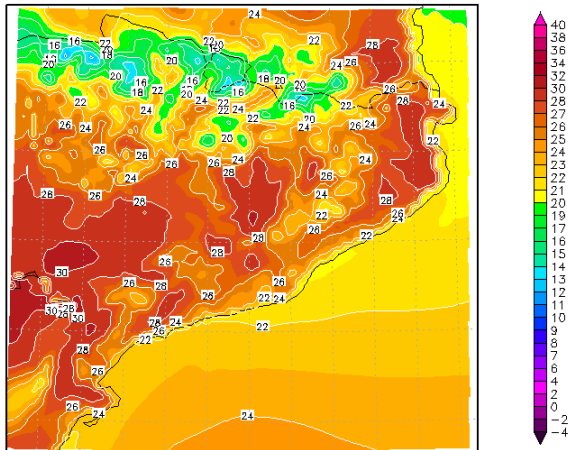
Per últim, pel que respecta a la humitat, s'observa una tendència a proporcionar majors humitats sobre el mar per qualsevol de les configuracions WRF, mentre que sobre terra la tendència és de signe contrari, proporcionant MM5-MRF previsions de més humitat relativa que WRF. Per tant, MM5 tendirà a produir una major deposició humida que les diferents configuracions WRF sobre terra.

MM5v3.7 – Temperatura 2m (oC) 12Z28JUL2009



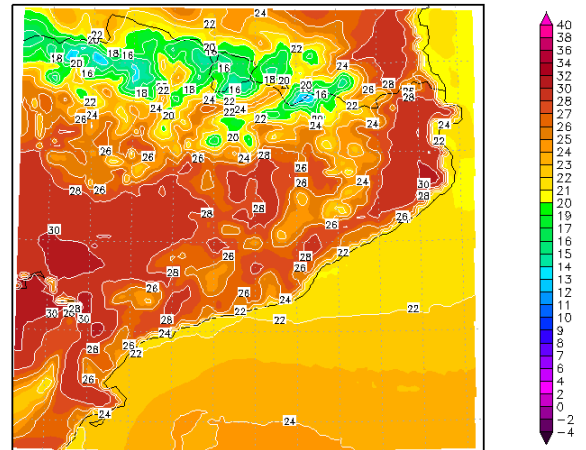
YSU

WRFv3.1.1 – Temperatura 2m (oC) 12Z28JUL2009



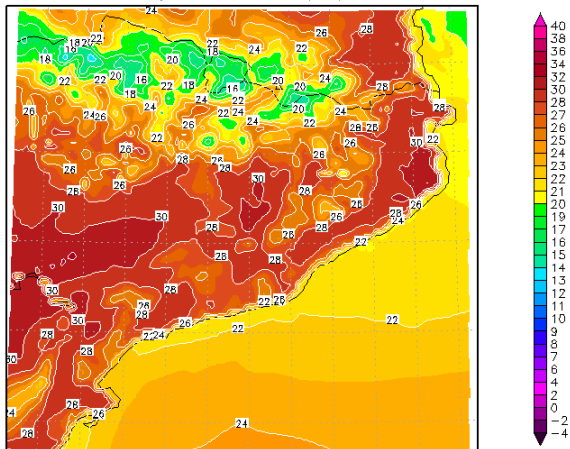
MYJ

WRFv3.1.1 – Temperatura 2m (oC) 12Z28JUL2009



ACM2

WRFv3.1.1 – Temperatura 2m (oC) 12Z28JUL2009



QNSE

WRFv3.1.1 – Temperatura 2m (oC) 12Z28JUL2009

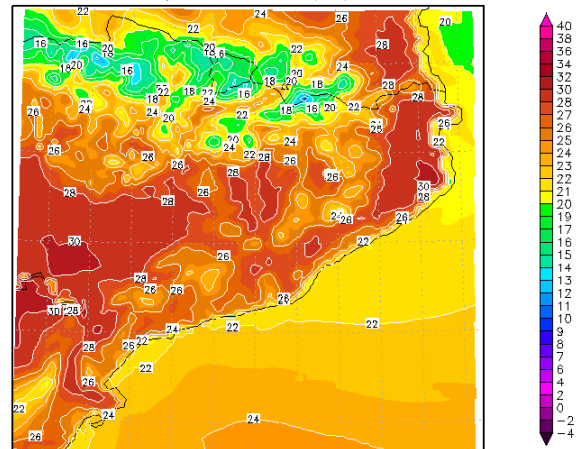


Figura 8.2. Temperatura a 2m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 28 de juliol de 2009 a les 12UTC.

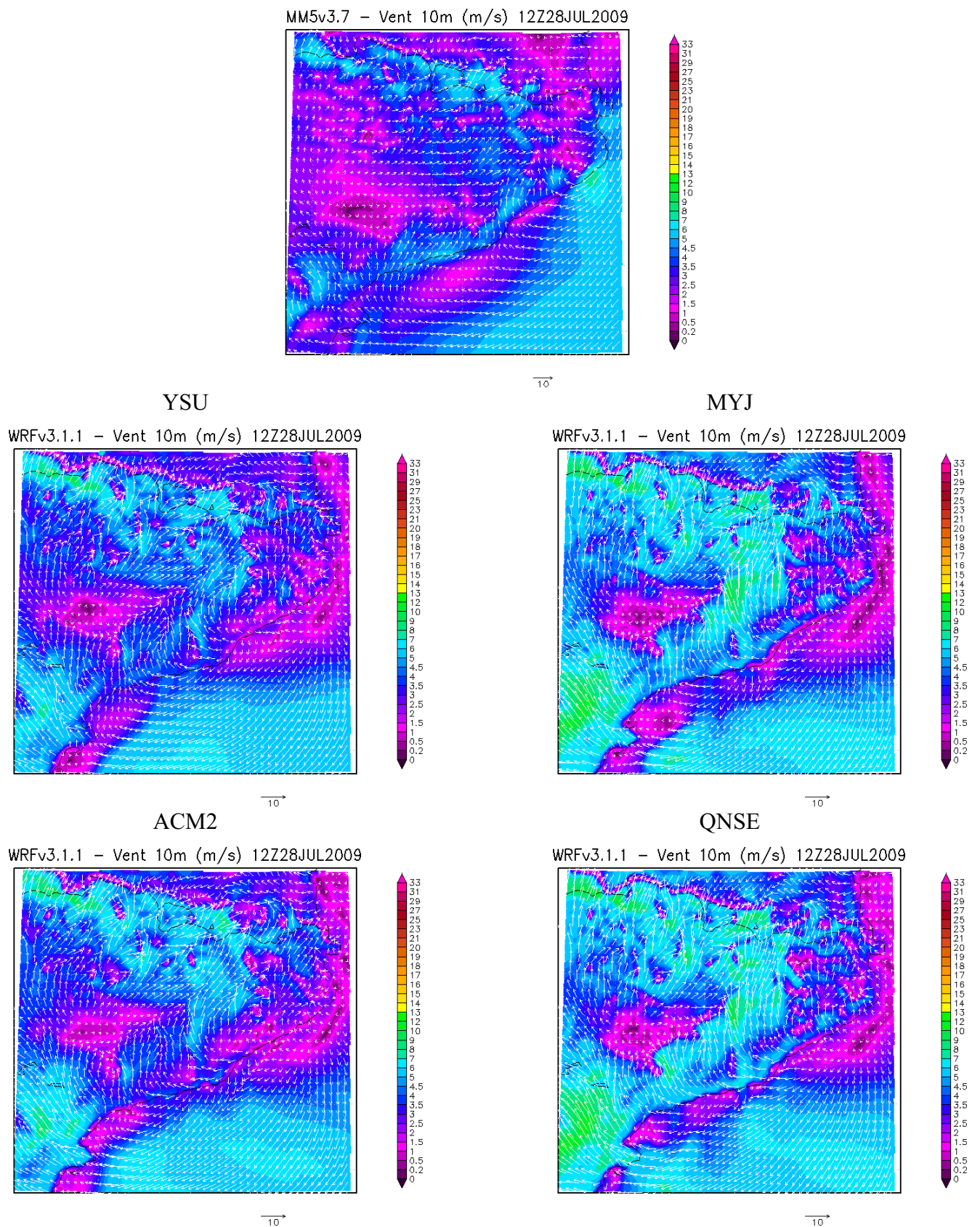


Figura 8.3. Vent a 10m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 28 de juliol de 2009 a les 12UTC.

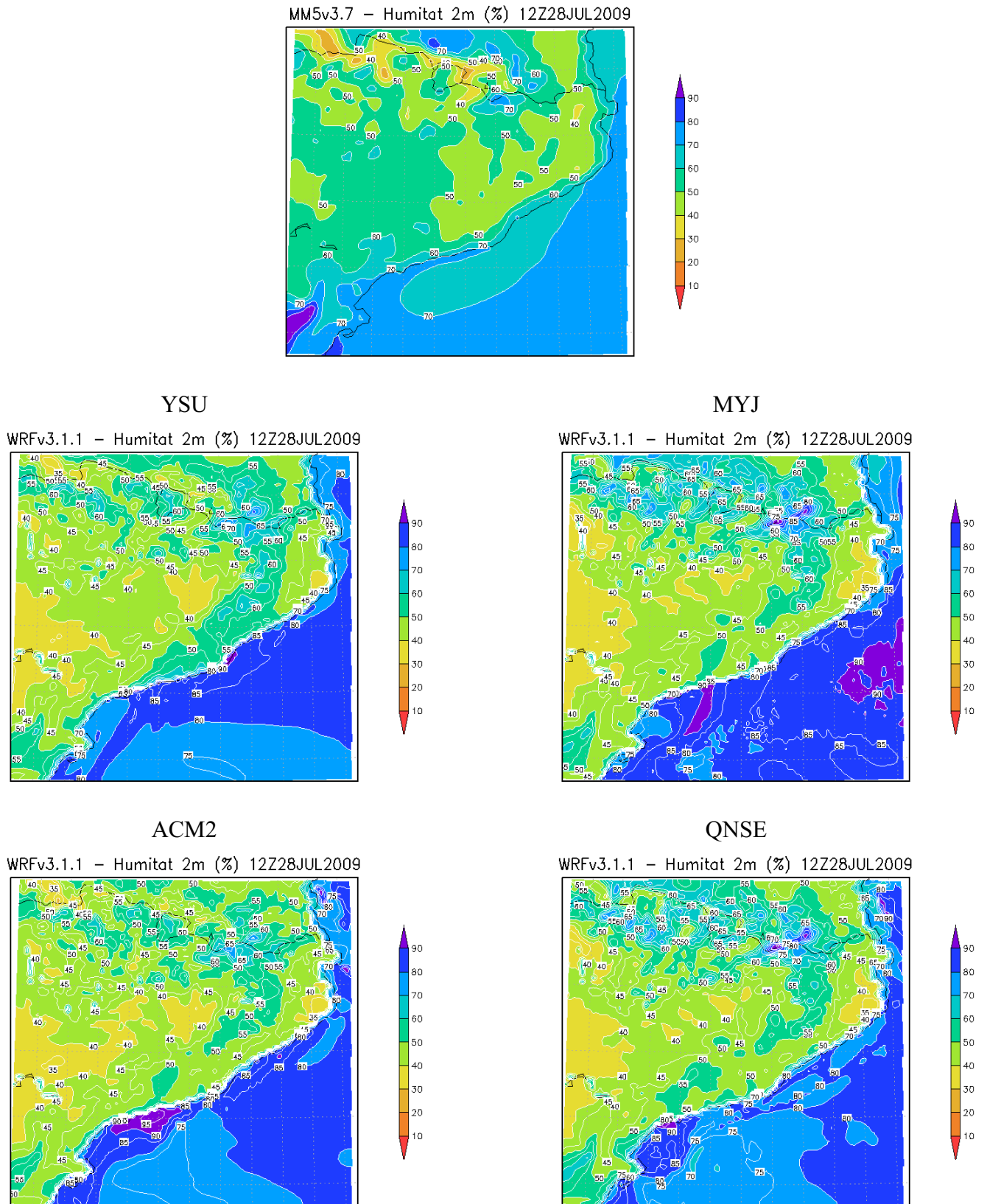
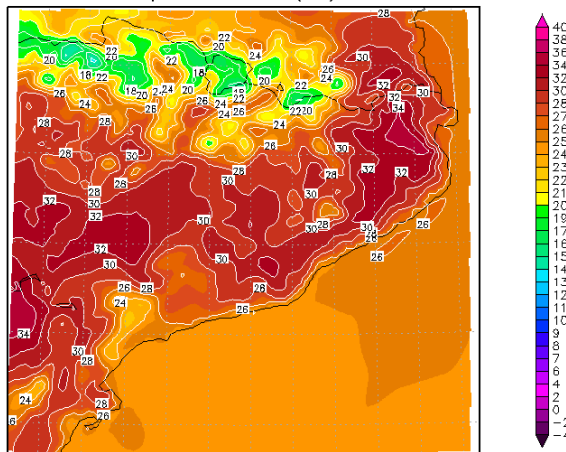


Figura 8.4. Humitat relativa a 2m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 28 de juliol de 2009 a les 12UTC.

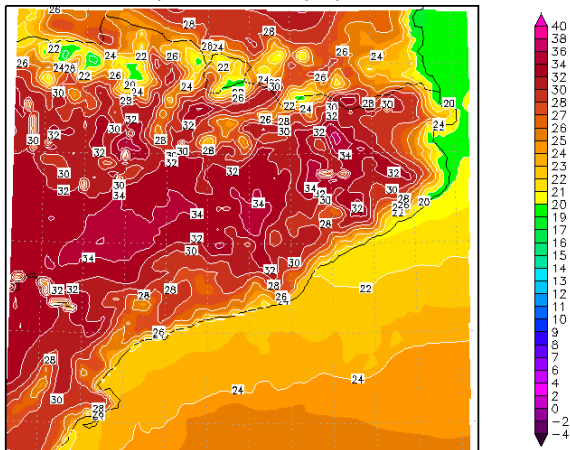


MM5v3.7 – Temperatura 2m (oC) 12Z06AUG2009



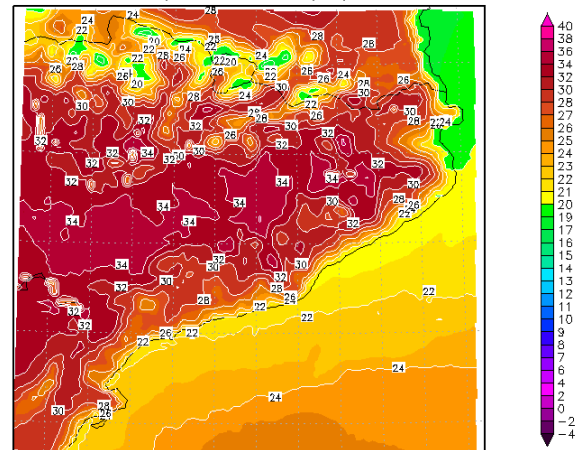
YSU

WRFv3.1.1 – Temperatura 2m (oC) 12Z06AUG2009



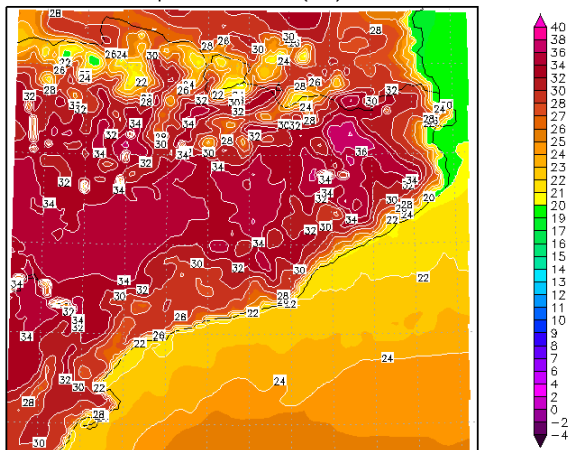
MYJ

WRFv3.1.1 – Temperatura 2m (oC) 12Z06AUG2009



ACM2

WRFv3.1.1 – Temperatura 2m (oC) 12Z06AUG2009



QNSE

WRFv3.1.1 – Temperatura 2m (oC) 12Z06AUG2009

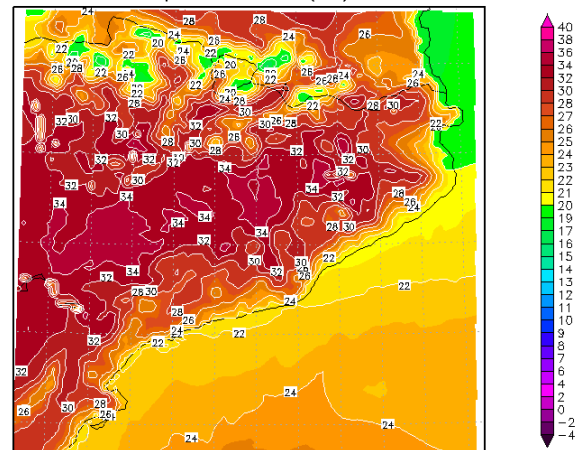


Figura 8.5. Temperatura a 2m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 6 d'agost de 2009 a les 12UTC.

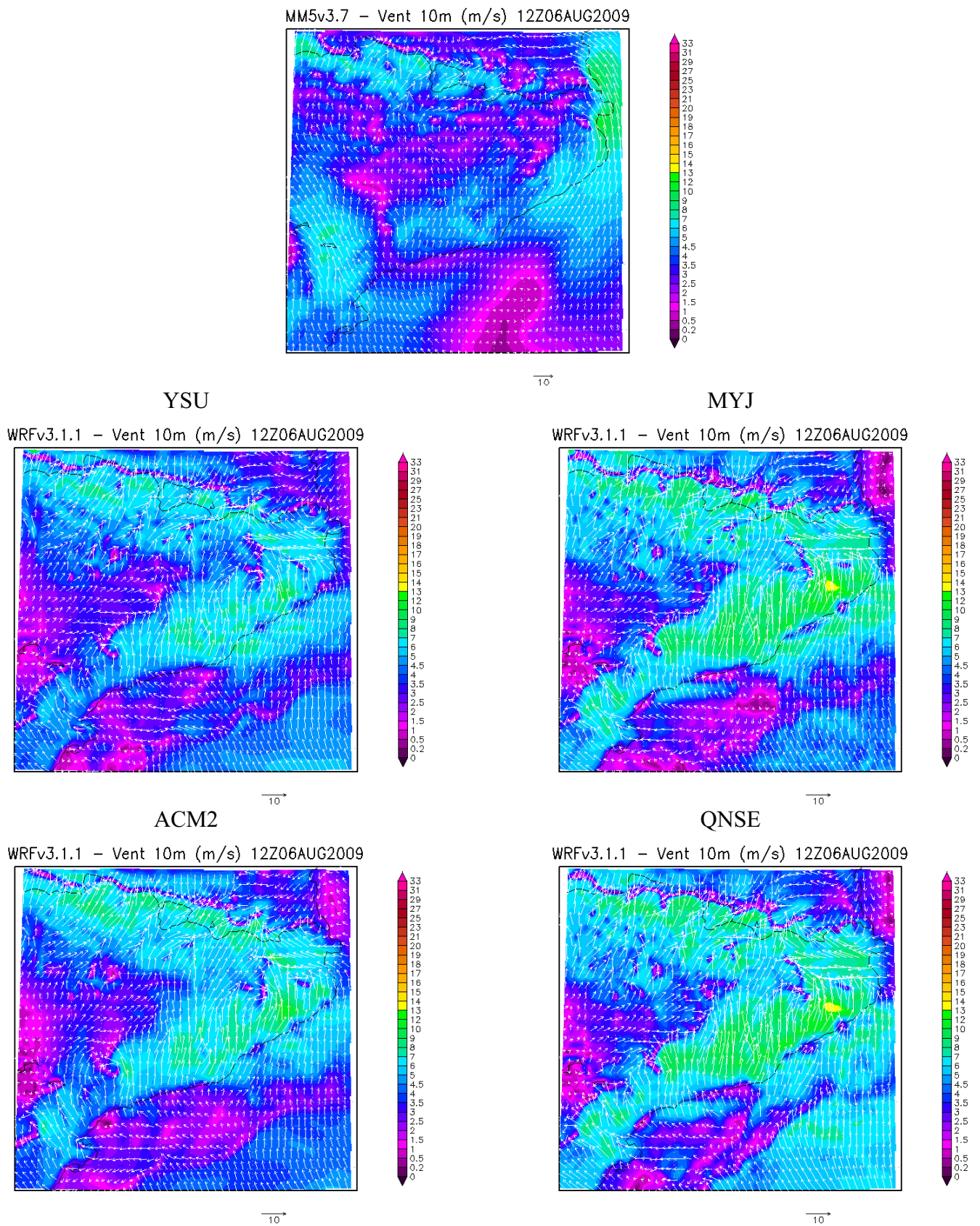


Figura 8.6. Vent a 10m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 6 d'agost de 2009 a les 12UTC.

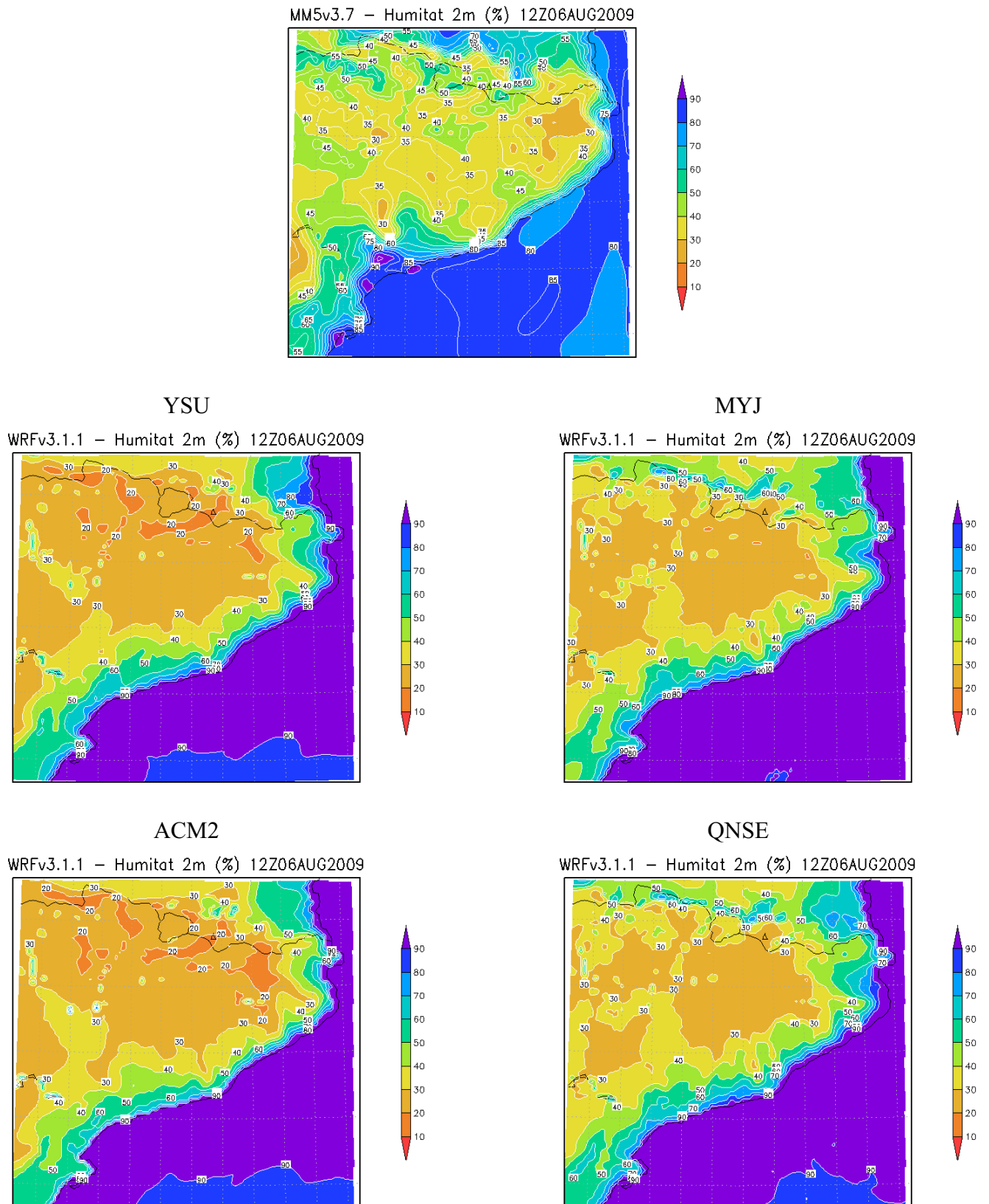


Figura 8.7. Humitat relativa a 2m segons MM5 i les diferents configuracions WRF pel dia 6 d'agost de 2009 a les 12UTC.



Un altre dels paràmetres dels models meteorològics que cal estudiar perquè influeix directament en la concentració mesurada de contaminants atmosfèrics és el pronòstic de l'alçada de la capa límit atmosfèrica. Aquesta variable és d'especial interès en el pronòstic d'alguns contaminants primaris com el material particulat PM10 i en d'altres èpoques de l'any diferents a la estudiada, com podrien ser els períodes d'hivern. En el cas de l'ozó troposfèric, l'alçada de la capa límit és un dels factors que determinen diferències entre les concentracions d'ozó pronosticades, però hi ha d'altres factors meteorològics com són la temperatura, la radiació solar o el camp de vents que hi tenen un efecte superior.

Degut a la no disponibilitat de mesures de l'alçada de la capa límit a l'àrea d'estudi, el doctorand no ha pogut comparar les previsions de cadascun dels experiments amb la realitat. Tot i així, sabem que alçades grans afavoreixen la mescla i la dispersió dels contaminants i per tant la reducció de les seves concentracions. A mode d'exemple, a la figura 8.8 es presenten les evolucions diàries de l'alçada de la capa límit pels dos períodes d'estudi a un àrea d'especial interès per l'ozó, com és Vic, ja que es produeixen sovint a l'estiu valors màxims superiors als llindars d'informació. S'observa com MM5-MRF en tots dos casos afavoreix que el màxim de l'alçada de la capa límit es produeixi amb unes hores de retard respecte el que pronostiquen les diferents configuracions WRF. Respecte el comportament de cada experiment envers el pronòstic de l'alçada de la capa límit s'hauria d'estudiar els seus valors a diferents àrees del territori i comparar amb observacions per extreure resultats concloents.

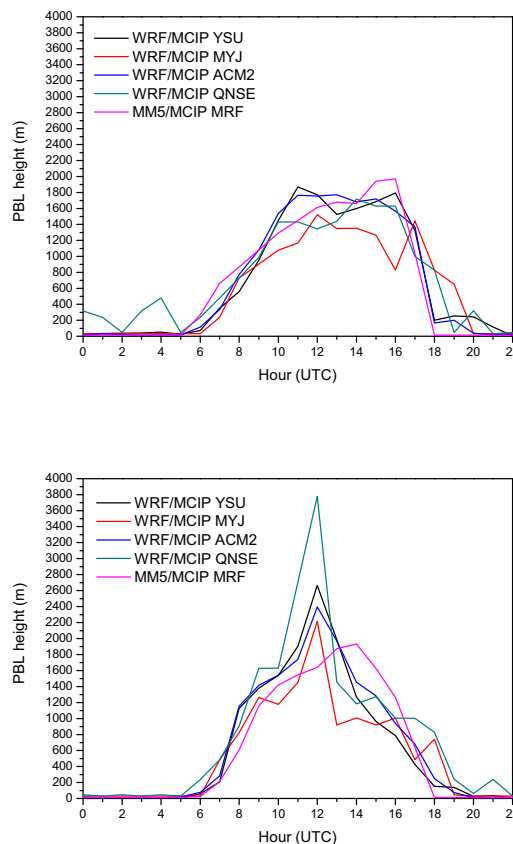


Figura 8.8. Evolució diària de l'alçada de la capa límit segons els diferents experiments pels dies 28 de juliol (superior) i 6 d'agost (inferior) de 2009.

### 8.1.2. Sensibilitat del model CMAQ

Abans de presentar les diferències de cada experiment envers la concentració d'ozó troposfèric utilitzant les diferents configuracions dels models meteorològics, convé identificar quins seran els factors meteorològics més importants que poden influir directament sobre el pronòstic posterior de qualitat de l'aire. Per exemple, la temperatura de l'aire i la radiació solar incident pronosticada pel model WRF amb totes les configuracions estudiades preveu valors més alts d'aquestes variables que MM5-MRF, implicant per tant menor cobertura de núvols en les seves previsions (De Meij et al., 2009). La menor fracció de cel cobert en WRF-CMAQ afavoreix una producció d'ozó més gran, ja que la radiació solar incident s'utilitza en el càlcul de la velocitat de fotòlisi per a l'ozó (Appel et al., 2009). És difícil quantificar el impacte d'aquestes diferències en la concentració d'ozó ja que el impacte d'aquest efecte és local. A la figura 8.9 es mostra un exemple de la cobertura nuvolosa pronosticada per MM5-MRF i WRF-YSU (no s'observen diferències apreciables entre el pronòstic de la fracció de cel cobert de les diferents configuracions WRF).

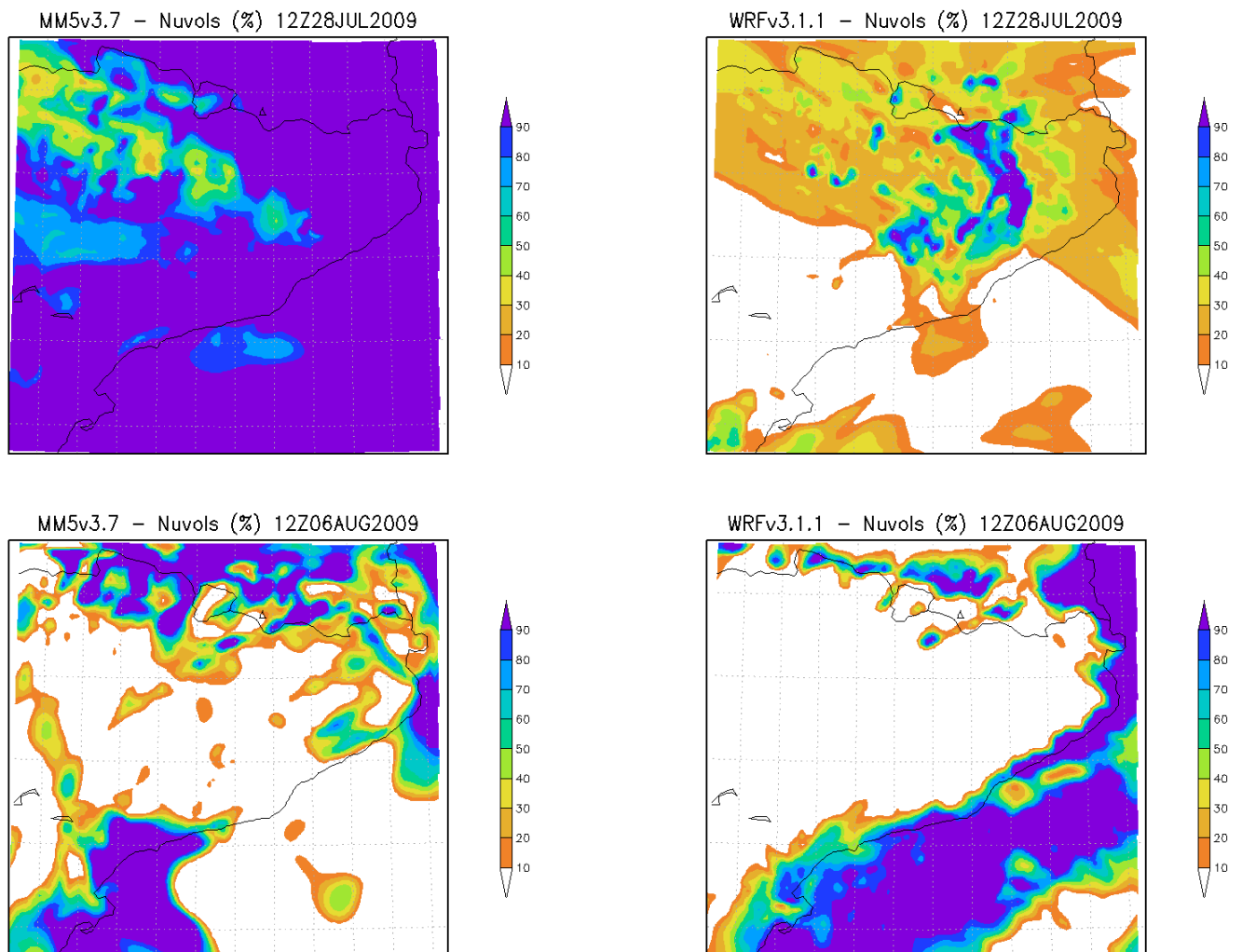


Figura 8.9. Comparació de la cobertura nuvolosa (%) pronosticada per MM5-MRF (esquerra) i WRF-YSU (dreta) pels dies 28 de juliol (superior) i 6 d'agost (inferior) de 2009 a les 12UTC.

Alhora, una major radiació solar incident i de la temperatura pronosticada pel model WRF implicarà que les emissions biogèniques proporcionades per MNEQA de gasos precursors d'ozó seran més altes, ja que la parametrització d'aquest tipus d'emissions depèn directament d'aquestes variables meteorològiques (Ortega, 2009a). Així, els compostos orgànics volàtils biogènics proporcionats per WRF-MNEQA són entre un 8% i un 15%, més alts que els proporcionats per MM5-MNEQA, mentre que per als òxids de nitrògens aquesta diferència és entre un 6% i un 15% (taula 8.4). Aquest efecte implicarà un augment de les concentracions d'ozó en àrees rurals i suburbanes.

Taula 8.4. Comparació entre les emissions biogèniques de NO<sub>x</sub> i VOCs calculades mitjançant el pronòstic meteorològic de MM5-MRF i diferents configuracions WRF.

Simulació	Espècie	$\frac{E_{MNEQA(wrf)} - E_{MNEQA(mm5)}}{E_{MNEQA(mm5)}} (\%)$			
		WRF-1 YSU	WRF-2 MYJ	WRF-3 ACM2	WRF-4 QNSE
28 de juliol 2009	NO <sub>x</sub>	14.85	12.89	15.44	11.29
	VOCs	13.77	12.32	14.79	10.33
6 d'agost 2009	NO <sub>x</sub>	11.04	9.28	12.13	6.44
	VOCs	11.83	11.90	14.88	8.30

D'altra banda, valors l'alçada de la capa de mescla més alts determinada pels diferents esquemes de PBL influirà incrementant la dispersió i afavorint la reducció de la concentració dels contaminants com s'ha comentat a la secció anterior.

També la deposició seca prevista per ambdós sistemes serà diferent, degut a les diferències entre la utilització d'un esquema de capa superficial o un altre. En aquest cas, les simulacions proporcionades per WRF-CMAQ donen velocitats de deposició d'ozó més baixes entre un 1 i un 18% que les que proporciona MM5-CMAQ. Per tant, que hi hagi una velocitat de deposició inferior en WRF, afavoreix que hi hagi una quantitat superior d'ozó a l'atmosfera. Alhora el model WRF també proporciona velocitats de deposició seca més baixes de NO<sub>2</sub>, i per tant, afavoreix que n'hi hagi una major quantitat de precursors d'ozó disponibles per a la seva formació.

Una vegada identificats aquests factors meteorològics, a les taules 8.5 i 8.6 es presenten els paràmetres estadístics de la taula 6.1 aplicats sobre els valors horaris, i màxims 1-h i 8-h d'ozó troposfèric, utilitzant només els parells de valors predicció i observació horaris, per als quals la concentració observada és més gran que un valor específic de 60µgm<sup>-3</sup>.

Taula 8.5. Valors del estadístics corresponents a les avaluacions dels sistemes MM5-CMAQ i WRF-CMAQ per la previsió de la concentració d'ozó del dia 28 de juliol de 2009.

Valors	Estadístic	MM5 MRF	WRF-1 YSU	WRF-2 MYJ	WRF-3 ACM2	WRF-4 QNSE
Horaris	MNBE (%)	1.46	-2.20	-2.67	1.59	-0.51
	MNGE (%)	26.51	20.48	19.33	22.53	20.42
	IOA	0.550	0.678	0.770	0.673	0.706
Màxim 1-h	MNBE (%)	19.84	8.62	6.99	16.53	7.86
	MNGE (%)	37.28	25.78	20.86	30.55	24.46
	IOA	0.526	0.584	0.733	0.563	0.602
	UPA (%)	15.92	5.08	-2.45	10.34	-2.48
Màxim 8-h	MNBE (%)	11.02	4.40	3.21	9.63	5.26
	MNGE (%)	30.48	21.07	17.09	24.10	20.97
	IOA	0.726	0.857	0.908	0.808	0.855
	UPA (%)	6.83	12.65	5.11	20.71	4.61

Taula 8.6. Valors del estadístics corresponents a les avaluacions dels sistemes MM5-CMAQ i WRF-CMAQ per la previsió de la concentració d'ozó del dia 6 d'agost de 2009.

Valors	Estadístic	MM5 MRF	WRF-1 YSU	WRF-2 MYJ	WRF-3 ACM2	WRF-4 QNSE
Horaris	MNBE (%)	-19.69	-20.18	-22.61	-18.78	-17.10
	MNGE (%)	23.08	23.88	25.95	23.29	21.54
	IOA	0.693	0.692	0.656	0.700	0.705
Màxim 1-h	MNBE (%)	-15.01	-13.74	-13.28	-10.00	-12.88
	MNGE (%)	17.02	15.79	14.72	14.17	15.21
	IOA	0.775	0.801	0.808	0.833	0.767
	UPA (%)	-8.19	-17.11	-14.67	-15.10	-21.82
Màxim 8-h	MNBE (%)	-15.63	-15.62	-16.44	-13.60	-13.99
	MNGE (%)	17.48	16.90	16.90	15.97	15.21
	IOA	0.908	0.920	0.919	0.921	0.923
	UPA (%)	-12.81	-16.07	-12.81	-15.43	-18.39

Per la simulació corresponent al 28 de juliol de 2009, els valors horaris per l'esquema MYJ del model WRF mostra una millora en la previsió respecte a la del sistema MM5-CMAQ. Per les concentracions màximes 1-h i 8-h, els dos sistemes de modelització tendeixen a sobrevalorar les concentracions d'ozó, encara que el valor de MNGE en la previsió de WRF-CMAQ és entre un 9% i un 18% inferior al donat per MM5-CMAQ. Si es consideren les configuracions del model WRF, MYJ proporciona els millors resultats en aquest cas. A més, les diferències en els patrons circulatoris, comentats anteriorment, tenen una influència directa en la distribució de concentracions d'ozó prevista per CMAQ, com es pot veure a la figura 8.10, que representa valors màxims 1-h de la concentració d'ozó. Així, s'observa com el patró de recirculació observat amb MM5-MRF pronostica valors alts al litoral i Prelitoral central i dins del mar. En canvi, en les configuracions on aquesta recirculació no és tan clara o no es reproduïx (YSU), el model CMAQ pronostica concentracions d'ozó més baixes. També s'observa que la localització dels màxims d'ozó i la forma dels plomalls d'ozó depenen de la combinació PBL-LSM utilitzada. Aquests resultats coincideixen amb els trobats per Pirovano et al. (2007).

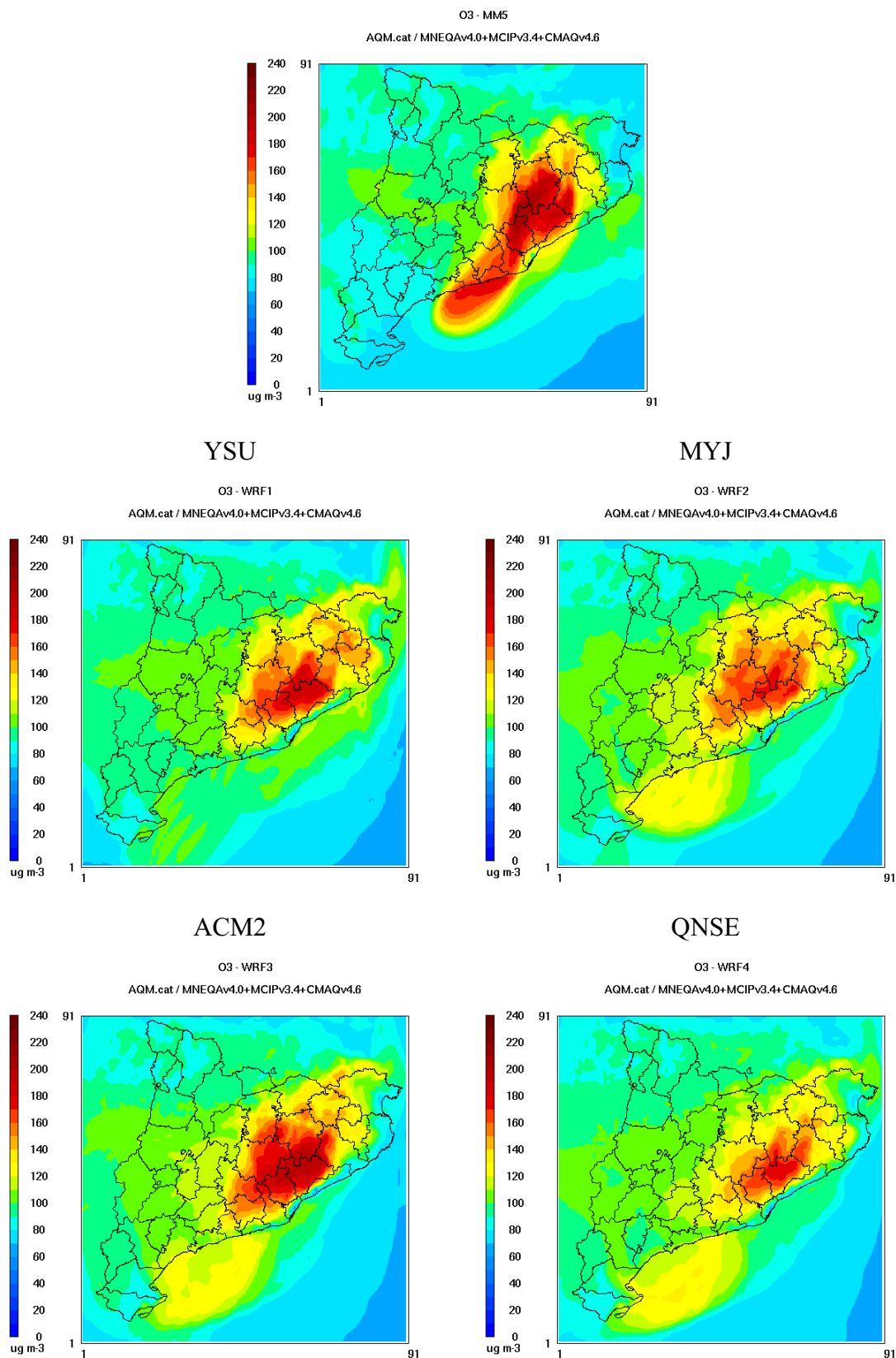


Figura 8.10. Distribució dels valors màxims 1-h de la concentració d'ozó pel 28 de juliol de 2009 previstos pel sistema AQM.cat utilitzant com a model meteorològic MM5-MRF i les diferents configuracions WRF.

Per a la simulació del 6 d'agost de 2009 (taula 8.6), les diferències en els valors mitjans de la concentració d'ozó són més grans que les diferències en la distribució geogràfica, resultat que és coherent amb els trobats per Minguzzi et al. (2005). És a dir, si en l'anterior episodi observàvem canvis en la distribució geogràfica a l'utilitzar un o altre esquema, i que per tant, uns esquemes proporcionaven una diferent representació geogràfica del plomall de concentració màxima d'ozó; en aquest, hi ha una relativa coincidència en la distribució geogràfica entre configuracions i en les mesures, les diferències es centren en el valor en magnitud de la concentració, sent en general més baixes les previsions que les observacions. Així, per a aquesta simulació, els dos sistemes subestimen les concentracions d'ozó, ja que els valors de MNBE i UPA per a cada hora i valors màxims 1-h i 8-h són negatius. Els valors estadístics que corresponen a l'avaluació de les diferents configuracions del model WRF mostren valors similars o lleugerament millors que els corresponents al sistema MM5-CMAQ, la configuració ACM2 és la que proporciona els millors resultats. A la figura 8.11 es mostren els valors màxims d'ozó previstos per cadascun dels experiments per l'episodi del 6 d'agost de 2009.

En general, si comparem les prestacions dels dos sistemes de modelització pels dos períodes estudiats, la del sistema MM5-CMAQ és similar pels dos períodes, mentre que la corresponent al sistema WRF-CMAQ és pitjor pel segon període. Dues possibles explicacions d'aquest comportament podrien ser: que les altes concentracions d'ozó enregistrades per aquest segon període estiguin associades amb recirculacions locals que no són ben previstes per cap dels sistemes de modelització; i degut a que el sistema és molt sensible a les precipitacions, de tal manera que el pronòstic de precipitacions disminueix de forma considerable els nivells d'ozó previstos, subestimant-los en comparació amb les mesures. Globalment, i a la vista de la comparació dels diferents esquemes WRF, els esquemes YSU i MYJ proporcionen els millors pronòstics per a utilitzar-los de forma operativa dins el pronòstic del sistema de modelització de la qualitat de l'aire AQM.cat, però és necessari ampliar el període de simulació per estudiar el comportament dels diferents experiments sota condicions meteorològiques diverses.

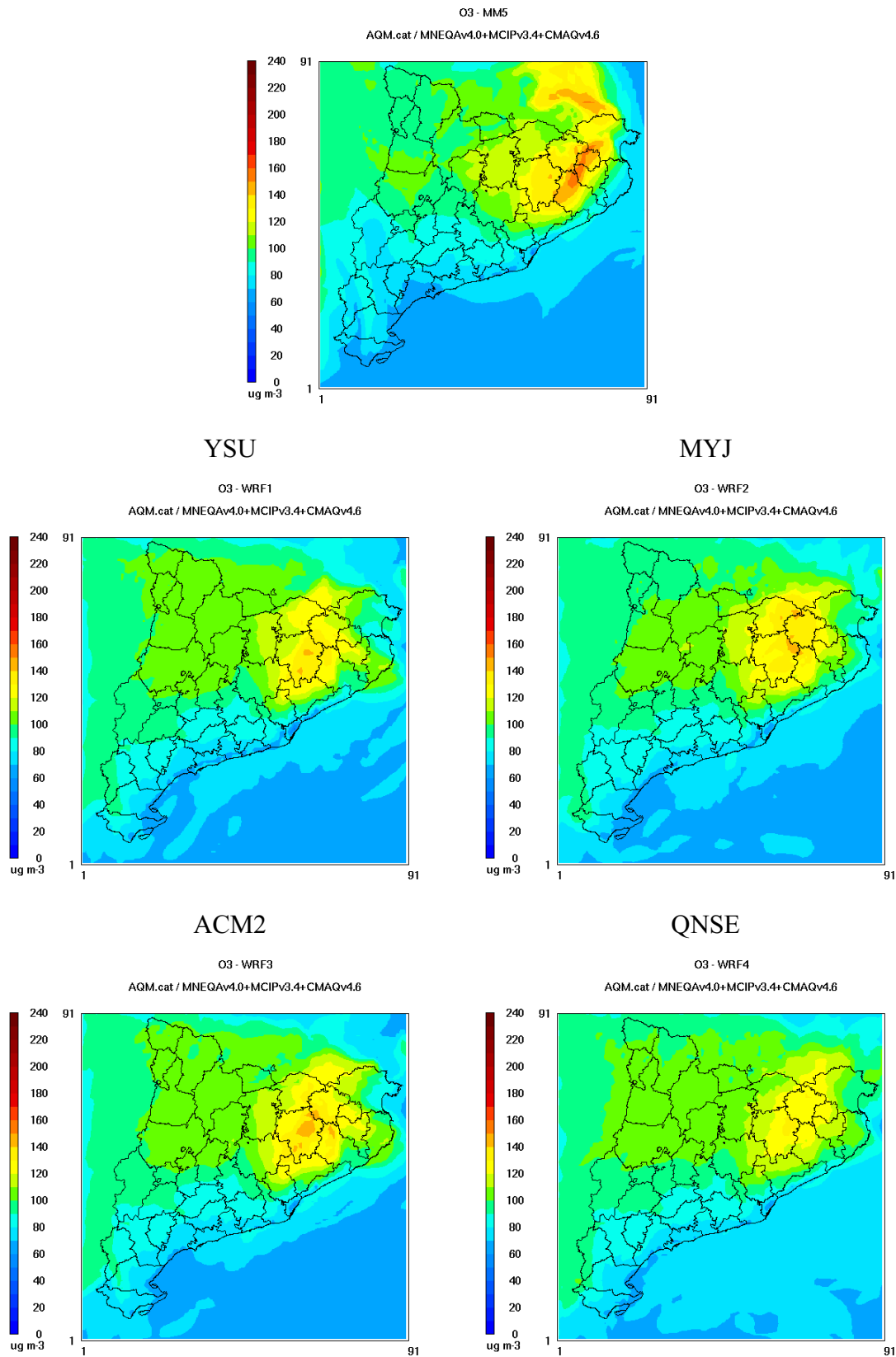


Figura 8.11. Distribució dels valors màxims 1-h de la concentració d'ozó pel 6 d'agost de 2009 previstos pel sistema AQM.cat utilitzant com a model meteorològic MM5-MRF i les diferents configuracions WRF.

