



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**



7. Diagnòstic i anàlisi de sensibilitat del sistema AQM.cat

En tot procés d'implementació d'un sistema de modelització com el que es presenta en aquesta tesi es requereix d'anàlisis que determinin i avaluin possibles millores sobre el pronòstic.

La validació estadística de les previsions durant el període 1 de maig – 30 de setembre de 2009 s'ha utilitzat com el mecanisme de primera avaluació dels resultats del sistema operatiu. Aquest fet va donar lloc a realitzar canvis sobre el mateix sistema que posteriorment s'hi van incorporar durant el període de pronòstic operatiu 1 de maig – 30 de setembre de 2010. Per avaluar aquests canvis, abans d'incorporar-los al sistema, el doctorand va realitzar estudis de diagnòstic i anàlisi de sensibilitat que en aquest capítol es presenten, donant resposta a la segona part del punt (6) del procés cronològic d'elaboració d'aquesta tesi doctoral presentat al capítol 1.

A fi d'identificar algunes possibles causes d'error dels pronòstics i avaluar possibles modificacions sobre el sistema, s'han realitzat diferents simulacions numèriques amb i sense aquestes modificacions. Als resultats de les simulacions que presenten les característiques del sistema sense aplicar la modificació a estudi l'anomenarem "Escenari Base" a partir d'ara (corresponent a AQM.cat-2009), i als resultats de les simulacions del sistema una vegada incorporada una determinada modificació l'anomenarem "Escenari Modificat" (corresponent a AQM.cat-2010). Per avaluar les possibles millores sobre el sistema, s'utilitzaran la sèrie de paràmetres estadístics comentats al capítol 6, observant i estudiant els canvis entre aquests.

La decisió del període de simulació pel que es van estudiar les possibles modificacions del sistema AQM.cat, s'ha restringit a aquells que complien els requisits recomanats per EPA (1991) en referència als paràmetres estadístics MNBE i MNGE obtinguts per a l'ozó troposfèric. D'entre tots ells, s'ha escollit el corresponent al període del 26 al 31 de juliol i ens centrarem en el dia 28 de juliol, dia en el que en algunes estacions es van superar el valor de $180\mu\text{m}^{-3}$ d'ozó troposfèric. Aquests paràmetres s'han calculat de forma diària per les 51 estacions considerades en l'avaluació estadística (taula 6.3) tant pels valors horaris, com per els valors màxims 1-h i els valors màxims 8-h (taula 7.1).

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.

Període	Valors Horaris		Valor Màxims 1-h		Valors Màxims 8-h	
	MNBE (%)	MNGE (%)	MNBE (%)	MNGE (%)	MNBE (%)	MNGE (%)
28 de Juliol de 2009	-11.27	20.08	3.15	22.97	-7.52	15.84

7.1. Incertesa de les emissions industrials

A la secció 4.2 d'aquest document es va comentar que les emissions industrials procedents del inventari de l'antic Departament de Medi Ambient i Habitatge (DMAH) de la Generalitat de Catalunya, després d'un procés exhaustiu de revisió, adoleixen d'incerteses que donaven lloc a la existència de concentracions no realistes d'alguns

contaminants com el diòxid de sofre i el material particulat PM10. A la taula 7.2, es presenten alguns d'aquests focus emissors i les seves característiques principals.

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

XUTM	YUTM	Municipi	Contaminat	Alçada (m)	Funcionament (hores any ⁻¹)	Emissió (g s ⁻¹)
292220	4494830	Alcanar	PST	31	8760	17.47
405750	4669925	Cercs	PST	120	8760	74.53
387200	4562100	Cubelles	PST	175	8760	16.80
299750	4636150	Ivars de Noguera	PST	9	2190	26.49
302200	4610300	Lleida	PST	2	7200	23.97
458775	4672150	Olot	PST	15	1060	10.66
381655	4568585	L'Arboç	SO ₂	91	8760	48.96
405750	4669925	Cercs	SO ₂	120	8760	443.18
351665	4562025	El Morell	SO ₂	61	8760	166.76
350825	4559865	La Pobla de Mafumet	SO ₂	114	8760	800.93
436039	4586663	Sant Adrià del Besòs	SO ₂	200	1923	100.90
436039	4586663	Sant Adrià del Besòs	SO ₂	200	1525	201.84
460170	4674110	Sant Joan les Fonts	SO ₂	15	8600	31.90
308900	4619750	Torrelameu	SO ₂	20	3285	194.44

Les emissions industrials d'aquest inventari presenten diferents dates de declaració, és a dir, procedeixen de mesures realitzades en diferents dates. Per tal de tenir un model d'emissió el més actualitzat possible la decisió que es va prendre va ser la d'utilitzar la última data de declaració.

Si bé és cert que les emissions han pogut disminuir en el temps ja que la legislació cada cop és més restrictiva en aquest sentit, s'ha observat que existien emissions per una mateixa font emissora amb diferents dates de declaració que es diferenciaven en un o com a màxim en tres ordres de magnitud, a la taula 7.3 es mostra un exemple. Aquest fet, continua portant a la conclusió, de que és necessari un millor ajust d'aquest tipus d'emissió, ja que afecta notablement als nivells d'immissió previstos pel sistema AQM.cat, especialment dels contaminants primaris.

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

XUTM	YUTM	Municipi	Contaminat	Emissió (g s ⁻¹)	Data de declaració
405750	4669925	Cercs	SO ₂	443.18	04-08-2004
405750	4669925	Cercs	SO ₂	695.57	14-08-2002
405750	4669925	Cercs	SO ₂	1129.16	07-04-1998
405750	4669925	Cercs	SO ₂	1102.88	09-05-1997
405750	4669925	Cercs	SO ₂	437.66	23-12-1994
405750	4669925	Cercs	SO ₂	1415.80	01-02-1993
405750	4669925	Cercs	SO ₂	1048.73	01-04-1991

Per resoldre per una banda el problema de les emissions no realistes del inventari de la Generalitat de Catalunya, i per l'altra, per incorporar una metodologia específica de tractament de les emissions en alçada, a la secció 4.3 s'ha presentat la incorporació de la metodologia de sobrelevació. Per avaluar aquesta incorporació s'han comparat els valors dels paràmetres estadístics de la taula 6.3 per a la simulació del 28 de juliol de 2009 amb i sense aplicació de la metodologia de sobrelevació. Els resultats mostren

que no hi ha pràcticament diferència pel que respecta a l'ozó troposfèric (taula 7.4) i el diòxid de nitrogen (taula 7.5). En canvi, s'evidencia la existència de valors extraordinaris de concentració de PM10 quan no s'aplica la metodologia de sobreelevació (figura 7.1), ja que les emissions extraordinàries de SO₂ i PM mostrades a la taula 7.2, influeixen sobre la concentració del material particulat.

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

Estadístic	Escenari Base (amb sobreelevació)	Escenari Modificat (sense sobreelevació)	Tipus de valors
MNBE (%)	-11.27	-11.66	Horaris
MNGE (%)	20.08	19.90	
MNBE (%)	3.15	1.39	Màxims 1-h
MNGE (%)	22.97	22.31	
MNBE (%)	-7.52	-8.43	Màxims 8-h
MNGE (%)	15.84	16.23	
IOA	0.692	0.691	Màxims 1-h
IOA	0.924	0.923	Màxims 8-h

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

Estadístic	Escenari Base (amb sobreelevació)	Escenari Modificat (sense sobreelevació)	Tipus de valors
MNBE (%)	-46.29	-48.11	Màxims 1-h
MNGE (%)	50.48	51.56	
IOA	0.585	0.574	Màxims 1-h

Per tant, es demostra que l'aplicació de la metodologia de sobreelevació no afecta considerablement les previsions de l'ozó troposfèric i el diòxid de nitrogen, i es mostra com una eina pràctica per solucionar el problema dels valors no realistes i extraordinaris que el sistema de modelització AQM.cat preveu pel SO₂ i per les PM10. Tot i així, la solució a aquest tipus d'emissions passa per un coneixement més profund dels valors d'emissió d'aquest tipus de fonts industrials, i es ressalta la necessitat d'una actualització continuada per part de l'administració i un anàlisi continu de la veracitat de les dades d'entrada del model d'emissió.

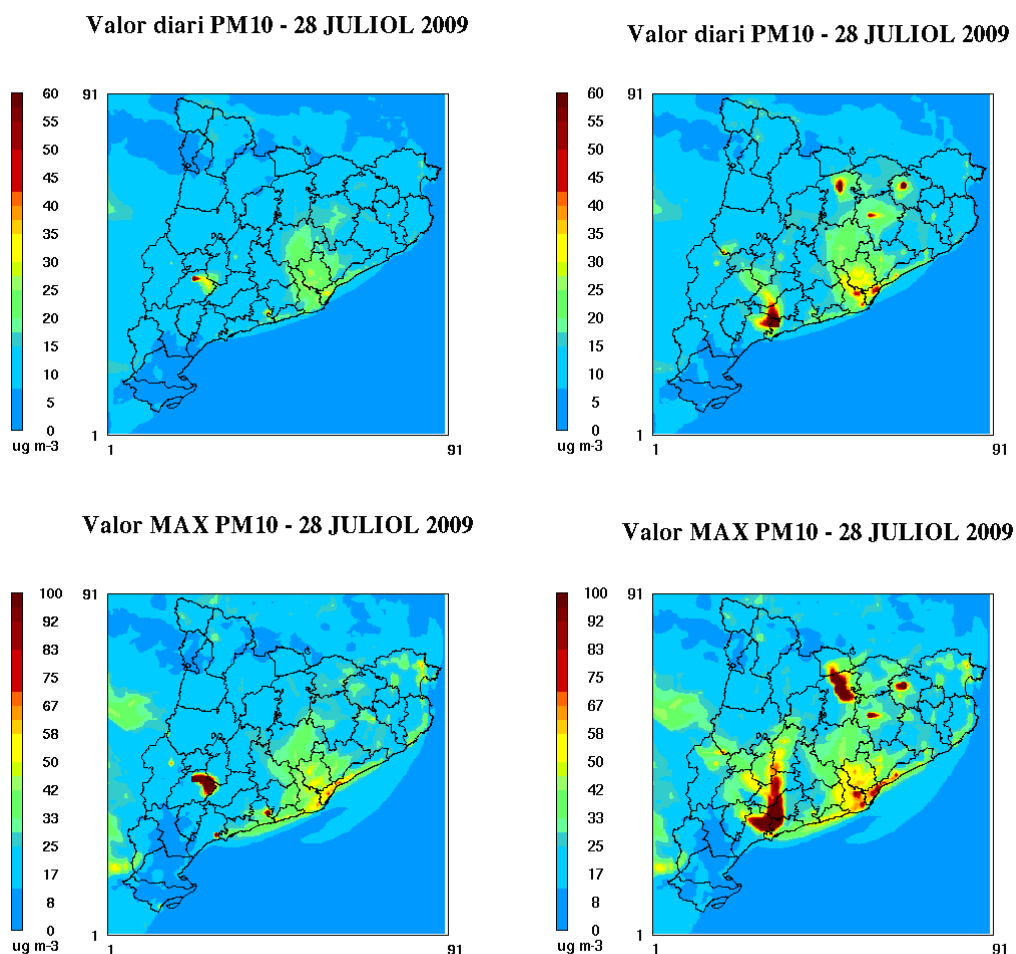


Figura 7.1. Valors diaris (superior) i màxims (inferior) del material particulat PM10 pel dia 28 de juliol de 2009, amb i sense aplicació de la metodologia de sobreelevació (esquerra i dreta respectivament).

7.2. Emissions del trànsit urbà per a resolucions horitzontals de 3km

El trànsit que es produeix dins de cadascun dels municipis del territori es modelitza mitjançant anàlisi objectiu a partir del càlcul real a la ciutat de Barcelona en el model d'emissions MNEQA (Arasa, 2007b; Ortega et al., 2009b), ja que és la ciutat més important situada en el domini d'estudi, té un gran parc automobilístic i una extensió que avarca varies cel·les del domini. Utilitzant dades de la xarxa de tràfic de Barcelona i de perfils horaris, amb informació dels quilòmetres per vehicle recorregut per cada tipus de via, i a partir dels factors d'emissió per velocitat menors a 50kmh^{-1} , s'ha pogut trobar les emissions causades pel trànsit urbà seguint la mateixa metodologia de càlcul de l'expressió 4.3.

La metodologia seguida en el càlcul del trànsit urbà, es basa en l'aplicació de tècniques d'anàlisi objectiu i consideracions associades a la diferència de població entre Barcelona i la resta de municipis de Catalunya. Així, per poder trobar les emissions de tots els municipis, s'han de tenir calculades les emissions de trànsit urbà a diferents punts del domini D3. Degut a la no disponibilitat d'aquesta informació, s'extrapola la emissió de Barcelona a d'altres punts del territori, reduint la emissió de Barcelona en

funció de la fracció de població que representa cada municipi respecte la població de Barcelona (expressió 7.1).

$$E_{i,urbana}^x = \frac{N_i}{N_{BCN}} E_{BCN,urbana}^x \quad (7.1)$$

On $E_{i,urbana}^x$ representa la emissió del trànsit urbà de la espècie x a la localitat i, i N_i representa la població del municipi i.

Una vegada es coneix la emissió deguda al trànsit urbà de diferents municipis a partir de la extrapolació la emissió de Barcelona i en funció dels habitants de cada municipi, es procedeix a realitzar un anàlisi objectiu similar al comentat a la secció 5.2. D'aquesta manera i gràcies a la utilització de factors de distància en la funció de Cressman (expressió 5.7), s'aconsegueix obtenir una representació de les emissions de trànsit urbà per tot el domini D3.

La naturalesa de la metodologia d'aplicació de les emissions de trànsit urbà va obligar a realitzar alguns canvis dins de MNEQA respecte els presentats a Arasa (2007b) i Ortega (2009b), durant el procés de disminució de la resolució horitzontal de 9 a 3km del sistema de modelització. Així, es van augmentar el número de punts que es consideren a l'hora de realitzar la interpolació objectiva, de les 20 ciutats inicials a 40 utilitzant diferents criteris d'elecció (taula 7.6). Els criteris per seleccionar els diferents municipis que actuaran són: major població; major densitat de població; per tenir una representació homogènia del territori; i per solucionar problemes de frontera en punts propers al vèrtex del domini D3.

Aquesta nova metodologia de càlcul de les emissions del trànsit urbà va ser incorporada a la versió del model d'emissions MNEQA v4.0. Per estudiar la millora que suposa sobre els resultats del sistema de modelització AQM.cat, es va realitzar l'avaluació dels resultats pel dia 28 de juliol de 2009, comparant els resultats previstos per l'escenari base, i per un escenari aplicant la nova metodologia de càlcul de les emissions degudes al trànsit urbà (taules 7.7 i 7.8).

En general, els resultats mostren una millora dels paràmetres estadístics calculats per l'ozó troposfèric, sobre tot pel que fa als valors màxims 8-h com es pot observar a la taula 7.7. D'altra banda, durant el dia 28 de juliol de 2008 es van produir superacions del llindar d'informació a la zona de qualitat de l'aire de la Plana de Vic, a les estacions de mesura de Vic i Manlleu. Com ja s'ha comentat anteriorment, la previsió dels màxims 1-h i la possibilitat de superar aquest llindar, és d'especial interès des del punt de vista de la legislació. Per aquest motiu, a la taula 7.8 es presenta la comparació dels valors màxims 1-h per aquest dia de simulació, observant una millora important de la capacitat del model per preveure aquest tipus d'incidències.

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

Municipi	Fracció de reducció $\frac{N_i}{N_{BCN}}$	Criteri d'elecció
Badalona	0.136	Major població i densitat de població
Barcelona	1.000	Major població i densitat de població
Figueres	0.026	Problema de frontera
Girona	0.058	Major població
Granollers	0.037	Major població
L'Hospitalet de Llobregat	0.158	Major població i densitat de població
Igualada	0.023	Per distribució homogènia del domini
La Seu d'Urgell	0.008	Problema de frontera
Lleida	0.080	Major població i superfície
Manresa	0.046	Major població
Mataró	0.075	Major població i densitat de població
Puigcerdà	0.006	Problema de frontera
Reus	0.066	Major població
Sabadell	0.126	Major població i densitat de població
Santa Coloma de Gramanet	0.073	Major població i densitat de població
Tarragona	0.084	Major població
Terrassa	0.127	Major població
Tortosa	0.022	Problema de frontera
Tremp	0.004	Problema de frontera
Vic	0.024	Per distribució homogènia del domini
Mollet del Vallès	0.032	Major població i densitat de població
El Prat de Llobregat	0.039	Major població
Vilanova i la Geltrú	0.040	Major població
Gavà	0.028	Major població i densitat de població
Sant Feliu de Llobregat	0.027	Major població i densitat de població
El Vendrell	0.021	Major població
Sant Joan Despí	0.020	Major població
Torroella de Montgrí	0.007	Problema de frontera
Ripoll	0.007	Per distribució homogènia del domini
Lloret de Mar	0.080	Major població i densitat de població
Vielha e Mijaran	0.003	Problema de frontera
Sort	0.001	Per distribució homogènia del domini
Solsona	0.006	Per distribució homogènia del domini
Ponts	0.002	Per distribució homogènia del domini
Tàrraga	0.010	Per distribució homogènia del domini
Batea	0.001	Problema de frontera
Amposta	0.012	Problema de frontera
Vandellòs i l'Hospitalet de l'Infant	0.003	Per distribució homogènia del domini
Flix	0.003	Per distribució homogènia del domini
L'Espluga de Francolí	0.002	Per distribució homogènia del domini

Taula 7.7. 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 de càlcul del trànsit urbà.

Estadístic	Escenari Base	Escenari Modificat (aplicant la nova metodologia del trànsit urbà)	Tipus de valors
MNBE (%)	-11.27	-9.44	Horaris
MNGE (%)	20.08	20.74	
MNBE (%)	3.15	9.92	Màxims 1-h
MNGE (%)	22.97	22.62	
MNBE (%)	-7.52	-3.67	Màxims 8-h
MNGE (%)	15.84	13.99	
IOA	0.692	0.743	Màxims 1-h
IOA	0.924	0.942	Màxims 8-h

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 ($180\mu\text{g}\text{m}^{-3}$) a la zona de qualitat de l'aire de la Plana de Vic.

Estació XVPCA	Mesurat	Escenari Base	Escenari Modificat (aplicant la nova metodologia del trànsit urbà)
Vic	183	165	192
Manlleu	182	160	184

En el cas de les previsions del diòxid de nitrogen aplicant la nova metodologia de trànsit urbà, s'observa una millora molt important en aquest nou escenari (taula 7.9). L'aplicació d'aquesta metodologia aconseguix reduir en un 20% el MNBE, i un 14% el MNGE calculat sobre els valors màxims 1-h. Per tant, reduïm considerablement la subestimació comentada al capítol 6.

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.

Estadístic	Escenari Base	Escenari Modificat (aplicant la nova metodologia del trànsit urbà)	Tipus de valors
MNBE (%)	-46.29	-25.29	Màxims 1-h
MNGE (%)	50.48	35.97	
IOA	0.585	0.698	Màxims 1-h

Pel que respecta a la comparació dels valors horaris, encara existeix una infraestimació evident (figura 7.2), especialment durant les hores diürnes. Tot i així, s'observa la millora sobre els valors de primera i última hora del dia, coincidents amb màxims de circulació a les carreteres.

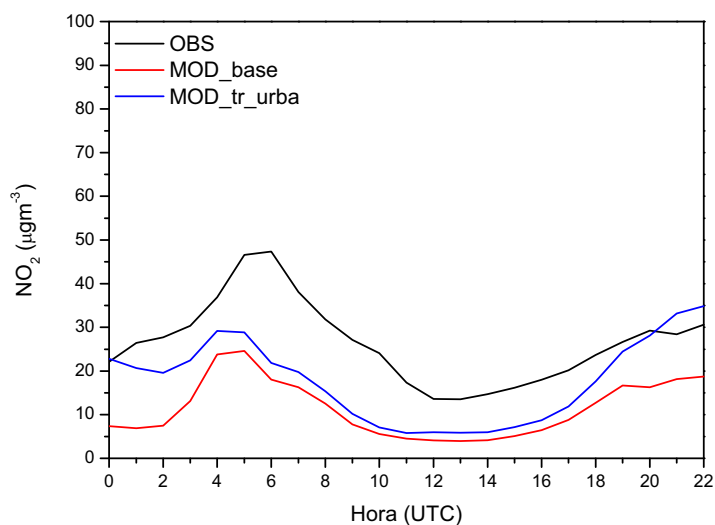


Figura 7.2. Evolució diària de les concentracions mitges de NO₂ pronosticades pel sistema AQM.cat segons l'escenari base (MOD_base) i l'escenari modificat (MOD_tr_urba), i de les mesures de les estacions de la XVPCA (OBS) pel dia 28 de Juliol de 2008.

Pel que respecta al material particulat, similarmet al cas del NO₂ la incorporació d'aquesta nova metodologia del trànsit urbà, millora apreciablement els resultats de la previsió (taula 7.10).

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.

Estadístic	Escenari Base	Escenari Modificat (aplicant la nova metodologia del trànsit urbà)	Tipus de valors
MNBE (%)	-30.99	-28.07	Valor diari
MNGE (%)	31.62	28.61	
IOA	0.555	0.614	

7.3. Aplicació de la disgregació espacial de les emissions EMEP

Com s'ha tingut ocasió de comentar a la secció 4.5, durant la fase de recerca del doctorand s'ha implementat una metodologia de disgregació de les emissions EMEP sobre l'àrea de Catalunya, i per extensió, a tota la Península Ibèrica i les Illes Balears. Així, en aquesta secció es mostren les diferències obtingudes dels camps de concentracions dels contaminants O₃, NO₂ i PM10 sobre el domini D3 quan s'acoblen aquest tipus d'emissions a les emissions calculades mitjançant la metodologia *bottom-up*. En aquest acoblament tan sols s'incorporen aquells sectors EMEP no considerats dins de la metodologia *bottom-up* (taula 4.6).

Així, es van estudiar els canvis que suposa la incorporació d'aquestes emissions al model d'emissions MNEQA. Els resultats que es mostren a continuació per l'ozó troposfèric (taula 7.11), diòxid de nitrogen (taula 7.12) i material particulat (taula 7.13),

són considerant l'aportació d'aquests diferents sectors (escenari modificat), comparat amb l'escenari base.

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.

Estadístic	Escenari Base	Escenari Modificat	Tipus de valors
MNBE (%)	-11.27	-7.35	Horaris
MNGE (%)	20.08	18.06	
MNBE (%)	3.15	7.64	Màx 1-h
MNGE (%)	22.97	18.88	
MNBE (%)	-7.52	-1.77	Màx 8-h
MNGE (%)	15.84	13.38	
IOA	0.692	0.800	Màx 1-h
IOA	0.924	0.951	Màx 8-h

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.

Estadístic	Escenari Base	Escenari Modificat	Tipus de valors
MNBE (%)	-46.29	-21.41	Màx 1-h
MNGE (%)	50.48	32.61	
IOA	0.585	0.743	Màx 1-h

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.

Estadístic	Escenari Base	Escenari Modificat	Tipus de valors
MNBE (%)	-30.99	-15.27	Diari
MNGE (%)	31.62	17.81	
IOA	0.555	0.701	

Dels resultats de la taula 7.11 observem com la incorporació d'aquesta metodologia millora sensiblement els pronòstics d'ozó troposfèric, disminuint tots els paràmetres estadístics considerats i augmentant fins un 16% el IOA. En el cas del diòxid de nitrogen, l'aplicació d'aquesta metodologia també millora els pronòstics, augmentant considerablement el IOA. Finalment, en el cas del material particulat, s'observa com les emissions de la disgregació espacial EMEP, milloren també considerablement les previsions d'aquest contaminant atmosfèric, reduint els estadístics MNBE i MNGE fins a valors dins dels límits establerts per EPA (1991).

A mode d'exemple, es presenta figura 7.3 la comparació dels resultats de material particulat PM10 previst pel sistema de modelització AQM.cat, incloent les emissions de tots els sectors considerats a la taula 4.6.

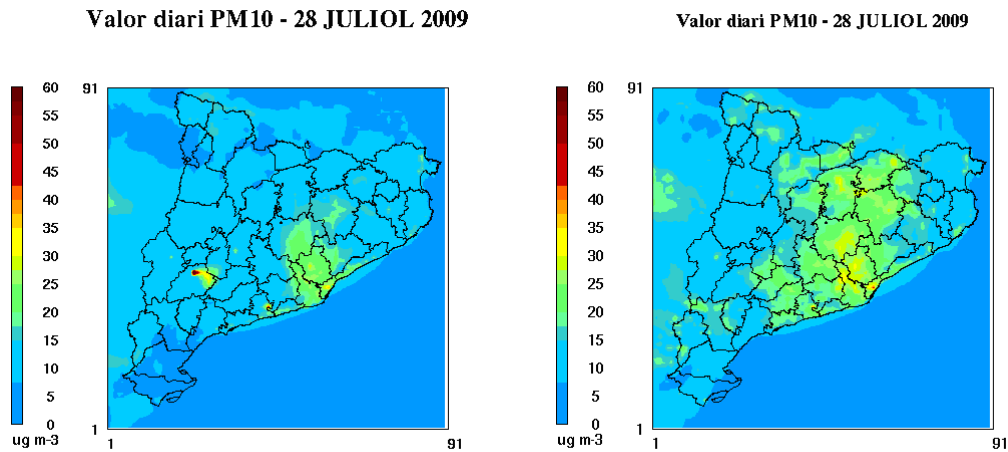


Figura 7.3. Valor diari de material particulat PM10 utilitzant MNEQAv3.0 (esquerra) i afegint la metodologia de disgregació espacial EMEP de MNEQAv4.0 dels sectors que la metodologia *bottom-up* no incorpora (dreta).

7.4. Coeficient de transport turbulent vertical

A la validació horària dels nivells d'ozó reproduïda al capítol 6 durant el període d'estudi corresponent a l'any 2009, es va observar una evident sobreestimació nocturna d'aquests nivells previstos per AQM.cat. Aquesta sobreestimació nocturna de l'ozó troposfèric pot estar deguda a una sobreestimació de la mescla vertical a la capa superficial.

L'esquema de mescla vertical que utilitza el model fotoquímic CMAQ prové del *Regional Acid Deposition Model* (RADM). Aquest, utilitza teoria de semblança per parametritzar la mescla turbulenta a prop de la superfície. Concretament, la mescla vertical es parametritza mitjançant teoria-K. Aquesta teoria s'introdueix com un dels mètodes per solucionar el problema de la indeterminació de les equacions que determinen la capa límit atmosfèrica i obtenir així, una descripció completa de la turbulència. Aquesta mètode de resolució local¹⁵ es basa en la substitució de variables de transport turbulent desconegudes per paràmetres coneguts (Stull, 1988). És útil per resoldre les indeterminacions d'ordre 1 (es desconeixen els moments de segon ordre del tipus $\overline{A'B'}$). Així, es defineix la teoria-K com a mètode de resolució i com a analogia a la difusivitat molecular. Les expressions 7.2 constitueixen un exemple de la teoria K per calcular moments de segon ordre. Als valors de K els anomenarem coeficients de difusivitat turbulenta.

¹⁵ El terme desconegut en un punt (x,y,z) és substituït per un paràmetre o gradient conegut en un punt $(x,y,z+\Delta z)$. No importa l'estat atmosfèric en la resta de punts, i tan sols s'estan tenint en compte els remolins més petits.

$$\begin{aligned}
 \overline{u'w'} &= -K_m \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \\
 \overline{v'w'} &= -K_m \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \\
 \overline{w'\theta'} &= -K_h \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \\
 \overline{w'q'} &= -K_e \frac{\partial \bar{q}}{\partial z}
 \end{aligned}
 \tag{7.2}$$

On u' , v' , w' corresponen a les tres components turbulentes de la velocitat del vent, \bar{u} , \bar{v} corresponen a les components mitges de la velocitat horitzontal (segons la descomposició de Reynolds); θ' i $\bar{\theta}$, components turbulenta i mitja de la temperatura potencial; q' i \bar{q} , components turbulenta i mitja de la humitat específica; i z l'alçada.

Similarment, es defineix un coeficient de difusivitat turbulenta per les espècies químiques, anomenat K_z , i que sovint s'acostuma a considerar igual a K_h .

A continuació presentem les equacions per la obtenció del paràmetre K_z per a diferents condicions d'estabilitat i tal i com el defineix el model fotoquímic CMAQ (Byun et al., 1999).

$$\begin{aligned}
 K_z(z) &= \frac{ku_*z}{\Phi_H\left(\frac{z}{L}\right)} && \text{A la capa superficial} \\
 K_z(z) &= \frac{ku_*z\left(1-\frac{z}{L}\right)^{3/2}}{\Phi_H\left(\frac{z}{L}\right)} && \frac{z}{L} > 0 \text{ (estabilitat)} \\
 K_z(z) &= kw_*z\left(1-\frac{z}{h}\right) && \frac{z}{L} < 0 \text{ (inestabilitat)}
 \end{aligned}
 \tag{7.3}$$

On k és la constant de von Karman, u_* és la velocitat de fricció, w_* és la velocitat de convecció, h és l'alçada de la capa límit, L és la longitud de Monin-Obukhov i $\Phi_H\left(\frac{z}{L}\right)$ és una parametrització adimensional del gradient vertical de temperatura potencial (7.4)

$$\begin{aligned}
 \Phi_H\left(\frac{z}{L}\right) &= \text{Pr}_0\left(1 + \beta_H \frac{z}{L}\right) && 1 \geq \frac{z}{L} \geq 0 \text{ (moderada estabilitat)} \\
 \Phi_H\left(\frac{z}{L}\right) &= \left(1 - \gamma_H \frac{z}{L}\right)^{-1/2} && \frac{z}{L} < 0 \text{ (inestabilitat)}
 \end{aligned}
 \tag{7.4}$$

On Pr_0 és el número de Prandtl per condicions d'estabilitat neutral, i β_H, γ_H són coeficients determinats a partir d'experiments de camp.

Estudis precedents (Zhang et al., 2006c) han demostrat que modificacions del coeficient vertical de transport turbulent K_z milloren sensiblement les concentracions d'ozó previstes pel model CMAQ durant la nit, primeres hores del matí i últimes hores de la tarda.

Tradicionalment, el valor mínim del coeficient de mescla vertical K_z en el model fotoquímic CMAQ presentava valors de $1\text{m}^2\text{s}^{-1}$. Mentre que els models meteorològics acostumen a utilitzar valors dins del rang $0.1\text{-}0.5\text{m}^2\text{s}^{-1}$. Diverses probes amb aquest model utilitzant aquest rang de valors típic dels models meteorològics, van mostrar altes concentracions no realistes de contaminants primaris sobre àrees amb important emissió com són les àrees urbanes (CMAS, 2009). En canvi, aplicacions amb valors alts del coeficient ($1\text{m}^2\text{s}^{-1}$) provocava sobreestimacions nocturnes especialment en àrees rurals. Per solucionar aquest problema, a partir de la versió CMAQv4.5, existeix la possibilitat de treballar amb un coeficient de transport turbulent vertical mínim $K_{z_{\min}}$ depenent de la fracció urbana F_{urbana} (figura 7.4) cada cel·la del nostre domini¹⁶ (expressió 7.5).

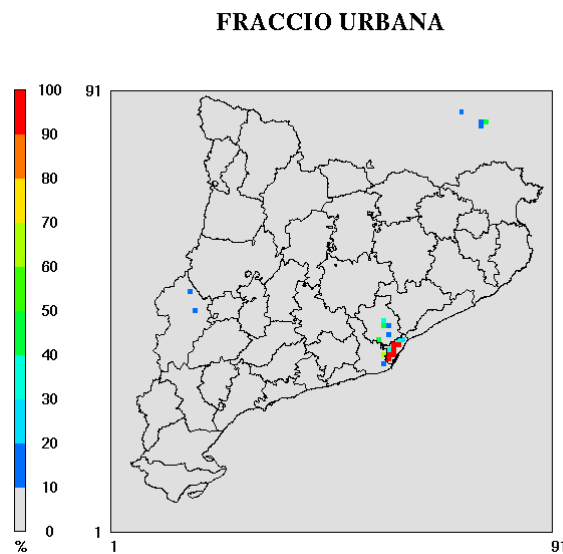


Figura 7.4. Proporció d'àrea urbana per cada cel·la del domini D3 segons MCIPv3.0.

$$K_{z_{\min}} = 0.5(1 - F_{urbana}) + 2F_{urbana} \quad (7.5)$$

Utilitzant l'expressió 7.5, $K_{z_{\min}}$ pot variar entre $0.5\text{m}^2\text{s}^{-1}$ (en cel·les sense àrea urbana) i $2\text{m}^2\text{s}^{-1}$ (en cel·les totalment urbanes) per reproduir l'efecte d'illa de calor urbana i l'efecte de la rugositat dels edificis.

Durant el període de simulació de 2009 es va utilitzar un valor de $K_{z_{\min}}$ fixada i igual a $1\text{m}^2\text{s}^{-1}$ que constitueix el cas base. Per aquest motiu, s'han realitzat diverses simulacions

¹⁶ Variable obtinguda a partir del mòdul d'acoblament meteorològic MCIP si el model meteorològic s'executa amb la opció de crear variables extra dins del Pleim-Xiu *Land Surface Model* (LSM).

per estudiar l'efecte d'aplicar un coeficient de transport vertical turbulent mínim dependent de la fracció urbana (figura 7.5).

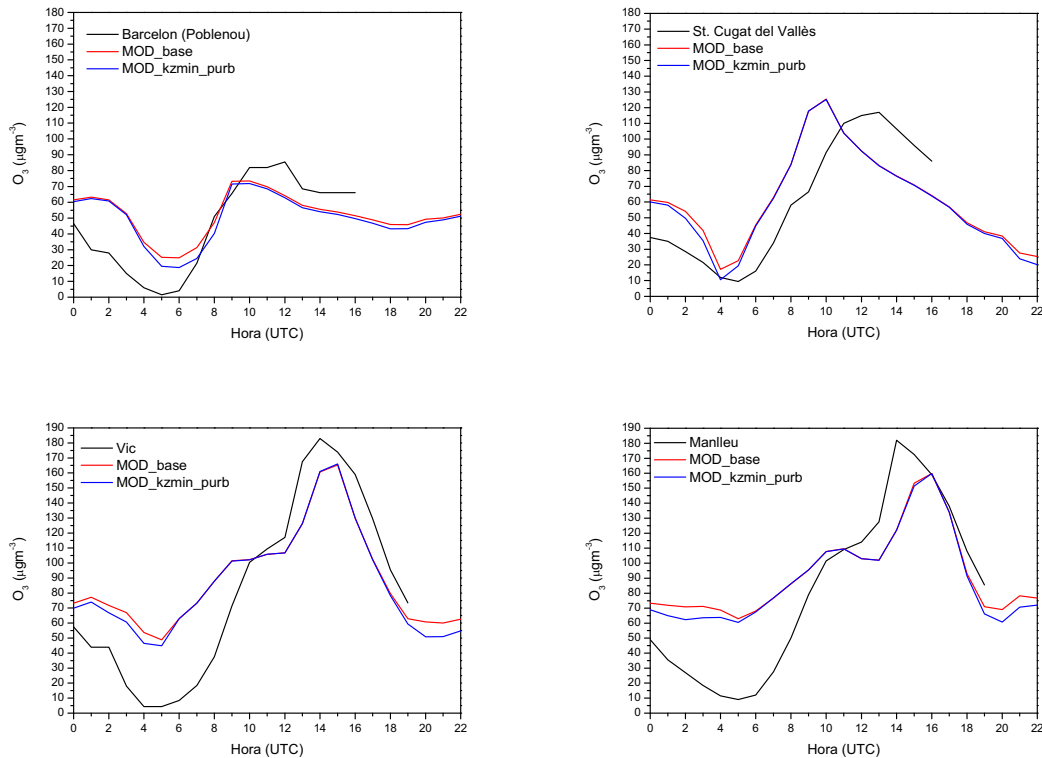


Figura 7.5. Evolució diària de les concentracions mitges de O₃ pronosticades pel sistema AQM.cat segons l'escenari base (MOD_base) i l'escenari modificat (MOD_kzmin_purb), i de les mesures de les estacions de la XVPCA pel dia 28 de Juliol de 2008.

Els resultats mostren que en el cas de l'ozó troposfèric, els estadístics de la taula 6.1 aplicats sobre els valors horaris, màxims 1-h i màxims 8-h, es mantenen pràcticament constants, amb diferències respecte l'escenari base que no superen el 0.5% (taula 7.14). L'efecte resulta especialment negligible sobre els valors màxims 1-h i 8-h ja que els valors del coeficient K_z diürns acostumen a ser més alts que els indicats com a $K_{z_{\min}}$. Tot i així, com es pot observar a la figura 7.5, existeix una disminució dels valors nocturns a l'aplicar aquesta metodologia.

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 dependent de la fracció urbana.

Estadístic	Escenari Base	Escenari Modificat $K_{z_{\min}} (F_{urbana})$	Tipus de valors
MNBE (%)	-11.27	-11.89	Horaris
MNGE (%)	20.08	20.37	
MNBE (%)	3.15	2.89	Màxims 1-h
MNGE (%)	22.97	23.11	
MNBE (%)	-7.52	-7.89	Màxims 8-h
MNGE (%)	15.84	16.10	
IOA	0.692	0.692	Màxims 1-h
IOA	0.924	0.923	Màxims 8-h

En el cas del diòxid de nitrogen, l'aplicació d'aquesta metodologia millora els principals paràmetres estadístics fins un 6% (taula 7.15), sent la millora més acusada en el cas dels valors màxims 1-h. En general, els màxims 1-h pel dia 28 de juliol de 2009, disminueixen un 6.2%. També el *Index of Agreement* presenta una millora a l'aplicar aquesta metodologia, d'aproximadament un 4%. Pel que respecta a la comparació horària, s'observa una millora en les previsions de NO₂ durant les hores nocturnes, primeres hores del matí i final del dia (figures 7.6 i 7.7).

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.

Estadístic	Escenari Base	Escenari Modificat $K_{z_{min}} (F_{urbana})$	Tipus de valors
MNBE (%)	-46.29	-40.08	Màxims 1-h
MNGE (%)	50.48	46.14	
IOA	0.585	0.612	Màxims 1-h

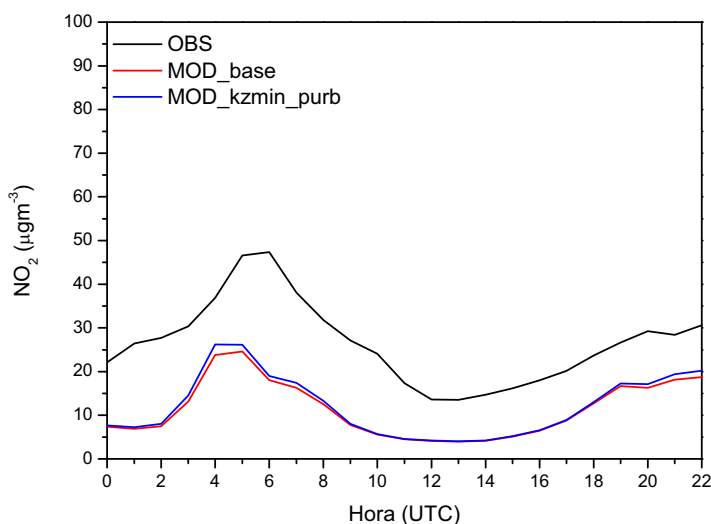


Figura 7.6. Evolució diària de les concentracions mitges de NO₂ pronosticades pel sistema AQM.cat segons l'escenari base (MOD_base) i l'escenari modificat (MOD_kzmin_purb), i de les mesures de les estacions de la XVPCA (OBS) pel dia 28 de Juliol de 2009.

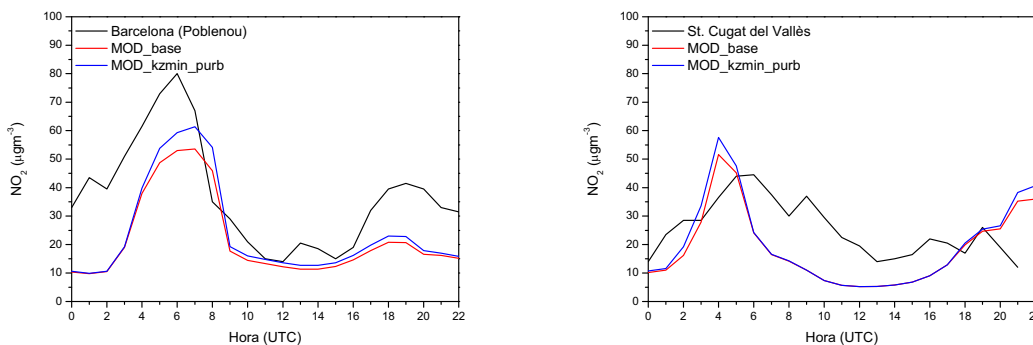


Figura 7.7. Evolució diària de les concentracions mitges de NO₂ pronosticades pel sistema AQM.cat segons l'escenari base (MOD_base) i l'escenari modificat (MOD_kzmin_purb), i de les mesures de les estacions de la XVPCA (OBS) pel dia 28 de Juliol de 2009.

Segons estudis precedents, la modificació d'aquest coeficient també afecta al sistema millorant les previsions de material particulat. A la taula 7.16 es presenta la comparació dels paràmetres estadístics obtinguts amb els valors previstos de PM10 amb i sense modificació del valor del coeficient de transport turbulent vertical. En general, s'observa com els valors diaris d'aquest paràmetres pel dia 28 de juliol de 2009, disminueixen un 2.8%. És a dir, s'obté un millor ajust dels paràmetres estadístics utilitzant aquesta modificació del paràmetre $K_{z_{\min}}$.

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.

Estadístic	Escenari Base	Escenari Modificat $K_{z_{\min}}(F_{urbana})$	Tipus de valors
MNBE (%)	-30.99	-28.22	Valor diari
MNGE (%)	31.62	30.13	
IOA	0.555	0.575	

A la vista dels resultats observats per a l'ozó troposfèric, el diòxid de nitrogen i les partícules PM10, el doctorand va incorporar aquesta modificació en els pronòstics operatius corresponents al període 1 de maig – 30 de setembre de 2010.

