

UTILIZACIÓN DE MODELOS CTM PARA LA ESTIMACIÓN DEL IMPACTO FOTOQUÍMICO DEBIDO A NUEVAS ACTIVIDADES INDUSTRIALES. METODOLOGÍA.

Enrique MANTILLA IGLESIAS, Núria CASTELL BALAGUER y
Rosa SALVADOR POLO
Fundación Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo (CEAM)
nuria@ceam.es

RESUMEN

La formación fotoquímica de ozono en una región determinada es el resultado de un complejo proceso químico en el que, a partir de sus precursores (óxidos de nitrógeno y compuestos orgánicos volátiles) intervienen una multiplicidad de especies diferentes, que interactúan entre sí según diferentes reacciones, dando lugar a un balance final altamente no lineal. Una consecuencia de esta química no lineal es que en una región dada, y dependiendo de las condiciones iniciales de partida, la introducción de una nueva fuente de emisiones puede tener consecuencias muy variables. En este trabajo se presenta una estrategia de trabajo que permite dar respuesta a la evaluación de la incidencia sobre la calidad del aire de las emisiones procedentes de nuevas actividades industriales.

Palabras clave: ozono, formación fotoquímica, sistema no lineal, impacto, emisiones, actividad industrial, modelización.

ABSTRACT

The photochemical ozone formation is the result of a complex chemical process with a nonlinear chemistry. Depending on the initial conditions, the introduction of a new source of emissions can have very variable consequences. The estimation of the photochemical impact due to new emissions becomes a difficult problem to solve. In this paper we present a methodology that allows managing the uncertainty associated with the limited knowledge of the initial conditions and the highly nonlinear dynamics of the involved processes. By this way, we can give an answer to the question of the evaluation of the incidence of the emissions coming from new industrial activity on the air quality.

Key words: ozone, photochemical impact, non-linear dynamics, emissions, industrial activity, modelling.

1. INTRODUCCIÓN

El comportamiento del ozono en la baja atmósfera presenta un carácter fuertemente no lineal, por lo que la evaluación del impacto sobre los niveles de concentración en superficie, debido a la presencia de emisiones procedentes de nuevas actividades

industriales, requiere contemplar necesariamente los diferentes aspectos (y sus interrelaciones) involucrados en la dinámica de los procesos fotoquímicos.

La formación fotoquímica de ozono en una región determinada es el resultado de un complejo proceso químico en el que, a partir de sus precursores, entre los que destacan los óxidos de nitrógeno (NO_x , de origen principalmente antropogénico -y en especial del tráfico-) y los compuestos orgánicos volátiles (VOC, debidos a la actividad industrial y a la vegetación), intervienen una multiplicidad de especies diferentes, que interaccionan entre sí según diferentes reacciones, dando lugar a un balance final altamente no lineal. Una consecuencia de esta química no lineal es que en una región dada, y dependiendo de las condiciones iniciales de partida, la introducción de una nueva fuente de emisiones puede tener consecuencias muy variables.

Así pues, el carácter no lineal del sistema hace que los cambios en los niveles originales de ozono, en respuesta a las nuevas emisiones, resulten variables en el tiempo y el espacio. En este comportamiento influyen no sólo la propia dilución de las emisiones, sino también los procesos de transformación de los diferentes compuestos en cada punto (dependientes de la presencia/emisión de otras especies químicas), las condiciones ambientales, etc.

La aproximación metodológica seguida para abordar el problema parte necesariamente del uso de herramientas de simulación de última generación (conocidos como modelos CTM, *Chemical and Transport Models*), capaces de reproducir con suficiente realismo los diferentes procesos involucrados, así como de la mejor información de base disponible. En este sentido, en la estimación del impacto se contemplan los procesos de transporte y dispersión en la atmósfera, la caracterización y cuantificación de las emisiones en el entorno, los procesos de transformación química, etc, todo ello para diferentes escalas espaciales de trabajo.

Para gestionar la incertidumbre derivada tanto de la propia naturaleza del sistema, como de las posibles carencias en la información de partida, y de la propia representación de los mecanismos físico-químicos, se diseña una matriz de escenarios potenciales de emisión en lugar de considerar una situación única. En la misma línea, y con objeto de minimizar la incertidumbre, el esquema metodológico seguido se centra en la estimación de los incrementos de concentración de ozono esperables tras la puesta en el sistema de las nuevas emisiones, más que hacia el cálculo de niveles absolutos de inmisión.

2. PLANTEAMIENTO

Una de las consecuencias de la química no lineal del sistema O_3 - NO_x -VOC, que hay que tener en cuenta a la hora de diseñar una estrategia de trabajo para la evaluación del impacto de nuevas emisiones es que en una región dada, dependiendo de las condiciones iniciales de partida (meteorología, ratio NO_x -VOC, etc.), la introducción de nuevas emisiones puede conducir tanto a un incremento como a un decremento en las concentraciones de ozono.

UTILIZACIÓN DE MODELOS CTM PARA LA ESTIMACIÓN DEL IMPACTO FOTOQUÍMICO DEBIDO A NUEVAS ACTIVIDADES INDUSTRIALES. METODOLOGÍA

De esta forma, la estimación del impacto fotoquímico debido a nuevas emisiones, no puede reducirse simplemente a un cálculo cuidadoso de los procesos físico-químicos involucrados (dispersión, transformaciones químicas, etc.), puesto que el error introducido en la estimación de las emisiones, que alcanza y puede llegar a superar el 300% (SIMPSON, 1995), puede dar lugar a escenarios de impacto de ozono muy diferentes entre sí.

Así pues, la química del ozono y de sus dos precursores principales, óxidos de nitrógeno (NO_x) y compuestos orgánicos volátiles (VOC) representa una fuente importante de incertidumbre en la química atmosférica y en la modelización fotoquímica (ATKINSON, 2000). Se conoce, que bajo ciertas condiciones, las concentraciones de ozono aumentan cuando aumentamos los NO_x y se mantienen insensibles a los VOC, mientras que bajo otras condiciones el ratio de formación de ozono aumenta cuando aumenta la concentración de VOC y se mantiene sin cambios o incluso decrece, al incrementar los NO_x . Esta complejidad química afecta al diseño de estrategias y también a la estimación del impacto que puede suponer la introducción de una nueva fuente de emisiones en una zona determinada.

El mayor problema a la hora de estudiar la sensibilidad del sistema químico formado por el ozono y sus precursores se encuentra en la falta de medidas directas. La ausencia de medidas de compuestos químicos vitales en la formación del ozono dificultan o imposibilitan una correcta calibración/ajuste del modelo fotoquímico, lo que hace necesario recurrir a una correcta gestión de la incertidumbre que tenga en cuenta los errores asociados a la cuantificación de las emisiones y a la química no lineal del ozono.

Generalizando, las dificultades que plantea la evaluación de la incidencia sobre la calidad del aire de las emisiones procedentes de nuevas centrales térmicas, se puede concretar esquemáticamente en los siguientes aspectos:

- (a) *Se demanda una respuesta de amplio rango temporal*; cuando se plantea la necesidad de conocer el impacto de una nueva actividad industrial, se está formulando implícitamente una cuestión climática; pero actualmente resulta una tarea inabordable la operación de los modelos más avanzados de simulación fotoquímica sobre periodos muy largos.
- (b) *Las herramientas deben recoger la interacción entre diferentes escalas*; en la formación de ozono en una región determinada participan una gran cantidad de procesos que se desarrollan a escalas muy diferentes, que deben ser consideradas, tanto desde el punto de vista meteorológico como desde el de las emisiones.
- (c) *Se precisa una descripción suficientemente realista de los procesos físico-químicos*; por ello se requiere el uso de herramientas suficientemente complejas que incorporen los principales mecanismos involucrados.
- (d) *Escasez de información*; habitualmente la información de partida es escasa y raramente satisface las necesidades de resolución demandada por los modelos, lo que obliga a efectuar un trabajo previo de preprocesado, con hipótesis más o menos forzadas.
- (e) *Necesidad de una gestión de la incertidumbre*; la aludida gran complejidad del sistema físico-químico requiere utilizar las herramientas con una estrategia que

permita adaptar los resultados de las mismas, en ocasiones muy profusos, a la pregunta del impacto en el campo de ozono.

(f) *Necesidad de una gestión de la información*; la salida de un modelo fotoquímico es abundante en información (resolución horaria, varios contaminantes, etc), que debe ser convenientemente tratada para dar respuesta a la pregunta planteada.

3. METODOLOGÍA

La estrategia metodológica seguida para estimar el impacto en el campo de ozono debido a la instalación de nuevas centrales térmicas de ciclo combinado, puede resumirse en los siguientes puntos o directrices:

(a) *Seleccionar unos escenarios de trabajo representativos* por su ocurrencia y a la vez muy favorables a la producción de ozono troposférico, de manera que los resultados resulten conservativos respecto al comportamiento general del sistema.

(b) *Utilización de técnicas avanzadas de modelización* para representar de la manera más fidedigna posible los procesos físico-químicos atmosféricos responsables de la formación de ozono.

(c) *Partir de la mejor información disponible sobre la zona*, de manera que se reduzcan las incertidumbres asociadas a los datos de entrada.

(d) *Poner en práctica una rutina de simulaciones* que permitan evaluar la incertidumbre de los resultados a partir de una matriz de probabilidades, obtenida a partir de una colección de escenarios, más que sustentada por una única estimación.

(e) *Proponer una compilación del gran volumen de información* generado en función de un conjunto abordable de magnitudes, que estén en relación con la legislación actual en materia de contaminación por ozono.

La selección de episodios se fundamenta, en primer lugar, en la lectura de los datos recogidos por la red de estaciones meteorológicas y los mapas meteorológicos sinópticos, de forma que el episodio o episodios escogidos gocen de cierta representatividad o ocurrencia climática. En segundo lugar, los episodios deben dar lugar a condiciones favorables a la producción fotoquímica de ozono, de forma que la red de vigilancia de calidad del aire registre niveles elevados de ozono.

En general, los niveles más altos de ozono se registran siempre preferentemente bajo condiciones de fuerte insolación y estabilidad atmosférica, por lo que el verano resulta en general el periodo más interesante desde el punto de vista de la producción fotoquímica. De esta forma, nos aseguramos que el episodio o episodios seleccionados son *representativos*, es decir, son escenarios meteorológicos que se repiten con suficiente frecuencia en la zona de estudio, y *conservativos*, es decir, conducen a niveles altos de ozono.

La complejidad del sistema a modelizar hace necesario la utilización de técnicas de modelos fotoquímicos multiescala y anidados, que permitan la interacción entre diferentes escalas, y que incluyan la descripción de los fenómenos fundamentales para la descripción de la formación de ozono. En general, la mejor opción para el modelado

UTILIZACIÓN DE MODELOS CTM PARA LA ESTIMACIÓN DEL IMPACTO FOTOQUÍMICO DEBIDO A NUEVAS ACTIVIDADES INDUSTRIALES. METODOLOGÍA

fotoquímico, es acoplar al modelo fotoquímico un modelo de emisiones (que incluya las emisiones biogénicas, de tráfico e industriales) y un modelo meteorológico.

Resulta interesante calibrar/ajustar las salidas del modelo meteorológico con los datos proporcionados por las estaciones meteorológicas de la zona de estudio, de forma que podamos asegurar unos campos meteorológicos lo suficientemente realistas.

El ajuste del modelo de emisiones suele ser más complicado, principalmente debido a la escasez de información. Ya que en general la única información de la que se dispone es de Inventarios de Emisiones donde las unidades temporales son anuales y la resolución espacial es provincial, mientras que la estimación del modelo es en unidades horarias y con resoluciones espaciales del orden de 1km.

En lo referente al modelo fotoquímico, y concretamente al ajuste del campo de ozono troposférico, hay que tener en consideración dos puntos importantes, ambos relacionados con las características del ozono:

(1) la compleja química del ozono, con un comportamiento no lineal en las reacciones entre NO_x -VOC- O_3 , imposibilitan la comparación directa de las series temporales de ozono modelizadas y las medidas, puesto que distintos escenarios de NO_x y VOC pueden dar lugar a un mismo valor de ozono; en cambio, según el escenario en el que nos encontremos, el campo de concentraciones de ozono al añadir una fuente de contaminación (en nuestro caso, una central térmica) puede ser completamente distinto.

(2) las concentraciones y dinámica del ozono varían sensiblemente en función de la ubicación de la estación de medida. Así, por ejemplo, una estación situada en un entorno urbano o industrial (con elevadas concentraciones de NO_x) medirá concentraciones menores de ozono que una estación de carácter rural (entorno sin fuentes de contaminación). Del mismo modo, la dinámica de una estación situada en el litoral será diferente a la dinámica de una estación situada a cierta altura sobre el nivel del mar.

De esta forma, la correcta calibración del modelo fotoquímico necesitaría de la medida de compuestos químicos, diferentes al ozono, que permitan acotar la región del espacio de fases de las reacciones NO_x -VOC- O_3 , y también de una red que cubra espacial y temporalmente la zona de estudio. En general, el problema al que nos enfrentamos a la hora de ajustar el campo de ozono es la falta de medidas de algunas especies químicas como el H_2O_2 o el HNO_3 , y al carácter principalmente urbano de la red de medida (BLANCHARD, 1999).

Para la gestión de la incertidumbre asociada al conocimiento limitado de las condiciones de partida (principalmente las relativas al escenario de emisiones) y a la naturaleza altamente no lineal de los procesos químicos involucrados, se propone trabajar sobre una matriz de escenarios de emisión, a partir del cálculo de las emisiones base obtenidas sobre la mejor información disponible, con objeto de generar, más que un resultado puntual determinista, un intervalo probable de variación, en el que quedaría comprendida la incertidumbre de la estimación.

En esta línea metodológica, se propone también el trabajar sobre las diferencias de concentración de ozono, más que sobre los valores absolutos de concentración. Los campos de diferencias se confeccionan a partir de la resta de los valores de inmisión resultado de las simulaciones, para cada escenario de emisión, realizadas con y sin las emisiones previstas de la actividad industrial a valorar (manteniendo, salvo la diferencia en dichas emisiones, la totalidad de los parámetros y condiciones de operación idénticas en cada caso). Con ello se contribuye a minimizar también la incertidumbre derivada del proceso de cálculo y del insuficiente conocimiento de las condiciones de partida que, hasta cierto punto, se anularía en la sustracción de los niveles.

Según se muestra en la figura 1, debe entenderse el *caso base* como el correspondiente a las simulaciones realizadas con la información disponible relativa a las emisiones, a partir de la cual se confeccionan los campos de entrada necesarios para el modelo fotoquímico. Para la variación de las emisiones, se propone tomar el máximo error estimado en las emisiones. De esta forma, los resultados se obtienen en forma de una matriz de nueve casos en los que se varían las concentraciones de NO_x y VOC. Con el análisis de los resultados obtenidos sobre dichas matrices se pretende acotar la incertidumbre asociada a la indeterminación de las emisiones.

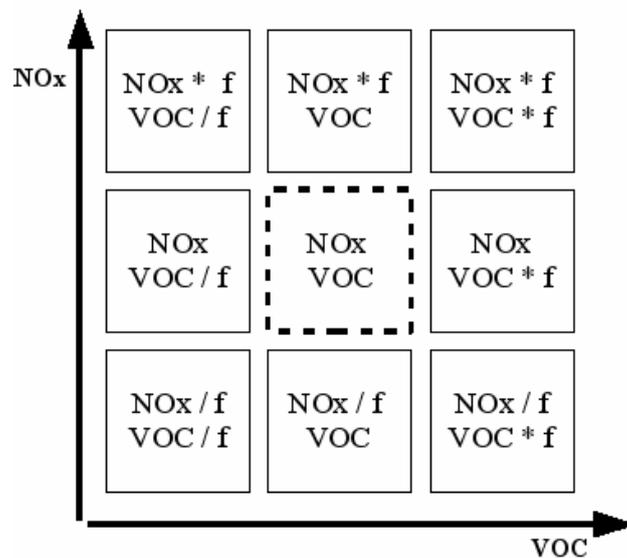


Fig. 1: matriz de escenarios de emisión confeccionada a partir del caso base (centro) estimado directamente de la información disponible de partida. La variación de los escenarios es función de un factor f definido en función de la cota de error de las emisiones.

Como resultado último de la modelización fotoquímica se obtienen una serie de campos de concentración de ozono (junto con otros contaminantes) con una resolución horizontal del orden de 1km y una resolución temporal horaria. Por lo que se dispone de una serie temporal de matrices tridimensionales y multiparamétricas, y todo ello para los 9 casos considerados en la matriz de escenarios. De ahí que resulte imprescindible compendiar esta información de manera que resulte manejable e ilustrativa a la evaluación del impacto asociado a las nuevas emisiones.

UTILIZACIÓN DE MODELOS CTM PARA LA ESTIMACIÓN DEL IMPACTO FOTOQUÍMICO DEBIDO A NUEVAS ACTIVIDADES INDUSTRIALES. METODOLOGÍA

En este sentido, se propone utilizar las referencias empleadas en la legislación actual (Real Decreto 1796/2003) como parámetros de referencia objetivos sobre los que hacer recaer la discusión de los resultados. De esta forma, es posible configurar, con la información generada a partir de las simulaciones fotoquímicas, dos tipos de resultados, siempre en forma de matriz de (nueve) escenarios, relativos a los promedios horarios y octohorarios de concentración superficial de ozono:

(a) *Estimaciones puntuales*, sobre los campos de diferencias, donde se resumen algunos parámetros estadísticos relevantes (máximos absolutos, medias, percentiles, etc.).

(b) *Distribuciones espaciales*, de algunos de los campos de diferencias considerados más representativos (como por ejemplo, las diferencias de máximos horarios y octohorarios).

Con las estimaciones puntuales se pretende dar respuesta a la variación en todo el dominio, o en regiones concretas del mismo, de la variación promedio, máxima, etc. Las distribuciones espaciales, nos permiten poner en relación las variaciones en el campo de ozono con zonas de interés como por ejemplo, núcleos de población, zonas de cultivo, parques naturales, etc.

El disponer de la información en forma de matriz en la que se representan diferentes escenarios de emisiones nos permite dar una respuesta, en primera aproximación, a la región química definida por el sistema O_3 - NO_x -VOC, en la que nos encontramos.

En la química O_3 - NO_x -VOC se distinguen regiones diferenciadas entre ellas. Dos regiones diferenciadas, son la *NO_x-sensitive* (sensibilidad a NO_x) y *VOC-sensitive* (sensibilidad a VOC). La primera se da en condiciones con una concentración relativamente alta de VOC y baja de NO_x , en ella el ozono se incrementa cuando aumentamos los NO_x , y permanece relativamente insensible a los cambios en las concentraciones de VOC. La segunda aparece cuando tenemos concentraciones relativamente bajas de VOC y altas de NO_x , en ella el ozono aumenta cuando incrementamos los VOC y decrece al aumentar los NO_x (SILLMAN, 1995, 2002, 2003).

4. CONCLUSIONES

La propia naturaleza de la formación de ozono en la atmósfera, de carácter altamente no lineal, requiere contemplar necesariamente diferentes aspectos para responder al efecto de cambios en el sistema (en el presente caso referidos a la potencial generación de nuevas emisiones): procesos meteorológicos de transporte y dispersión; cualificación y cuantificación de emisiones; procesos de transformación química. Para reducir la incertidumbre inherente a la propia modelización del sistema físico y químico atmosférico (cálculo coeficientes difusión, altura capa límite, nubosidad, constantes de fotólisis, reacciones químicas, etc.) es necesaria la utilización de herramientas de simulación de altas prestaciones (modelos CTM), capaces de reproducir de manera realista los mecanismos físico-químicos que participan en los diferentes procesos.

Sin embargo, siempre existirá una cota de errores que será necesario gestionar a fin de minimizar la indeterminación de los resultados. Se considera que la mayor incertidumbre en la estimación del impacto fotoquímico, con una influencia potencialmente relevante sobre las concentraciones de ozono, se sitúa en la estimación de las emisiones, tanto cualitativa como cuantitativamente (en tanto que constituyen la base de toda la reactividad química); de esta manera, la mejora de la evaluación del impacto fotoquímico pasa en gran medida por una mejora de la estimación de las emisiones.

Dado el carácter no lineal de la relación NO_x -COV- O_3 no es posible evaluar el impacto de las nuevas emisiones con una sola simulación, puesto que dependiendo de las concentraciones iniciales de óxidos de nitrógeno y compuestos orgánicos volátiles de las que partamos, el impacto varía, pudiendo pasar de un impacto positivo (aumentan las concentraciones de ozono) a un impacto negativo (disminuyen las concentraciones de ozono).

Para la gestión de la incertidumbre en la estimación del impacto fotoquímico debido a nuevas emisiones gaseosas, el diseño de una matriz de escenarios potenciales de emisión, que cubra tanto el posible error introducido en las emisiones como el carácter no lineal de la dinámica del ozono, y la utilización de diferencias más que un valor absoluto, se muestra como una metodología eficaz en este tipo de problemas.

5. AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo se realizó dentro del marco del proyecto “Profundización en el Diagnóstico de la Situación Ambiental del Entorno de la Ría de Huelva” financiado por la Junta de Andalucía.

El CEAM esta cofinanciado por la Generalitat Valenciana y Bancaixa. Las simulaciones se han llevado a cabo en el Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA).

6. REFERENCIAS

ATKINSON, R. (2000). “Atmospheric chemistry of VOCs and NO_x ”. *Atmospheric Environment*, 34, pp. 2063-2101.

BLANCHARD, C.L., LURNMANN, F.W., ROTH, P.M., JEFFRIES, H.E., KORC, M. (1999). “The use of ambient data to corroborate analysis of ozone control strategies”. *Atmospheric Environment*, 33, pp 369-381.

SILLMAN, S. (1995). “The use of NO_y , H_2O_2 and HNO_3 as indicators for ozone- NO_x -hydrocarbon sensitivity in urban locations”. *Journal of Geophysical Research*, 100 (D7), pp. 14175-14188.

SILLMAN, S., HE, D. (2002). “Some theoretical results concerning O_3 - NO_x -VOC chemistry and NO_x -VOC indicators”. *Journal of Geophysical Research*, 107 (D22), pp. 4659.

SILLMAN, S., VAUTARD, R. MENUT, L., KLEY, D. (2003). “ O_3 - NO_x -VOC sensitivity and No_x -VOC indicators in Paris: results from models and atmospheric

UTILIZACIÓN DE MODELOS CTM PARA LA ESTIMACIÓN DEL IMPACTO FOTOQUÍMICO
DEBIDO A NUEVAS ACTIVIDADES INDUSTRIALES. METODOLOGÍA

pollution over the Paris area (ESQUIF) measurements”. *Journal of Geophysical Research*, 108 (D17), pp. 8563.

SIMPSON, D., GUENTHER, A., HEWITT, C. N, STEINBRECHER, R. (1995). “Biogenic emissions in Europe. Estimates and uncertainties”. *Journal of Geophysical Research*, 100 (D11), pp. 22875- 22890.