

Capítulo 8

El modelo de emisiones EMICAT2000

8.1 Estructura y características generales

EMICAT2000 fue desarrollado en un sistema de información geográfica (ArcView GIS 3.2, de ESRI). Su configuración general se indica en la Figura 8.1. Actualmente incorpora los componentes para las emisiones biogénicas, tráfico vehicular, industrias y sectores residencial/comercial. Cada componente se estructura con módulos de almacenamiento y gestión de la información base, de cálculo de emisiones y de especiación. Las emisiones obtenidas en cada fuente se agregan en el módulo de gestión de los archivos de emisión.

Todos los algoritmos de cálculo y la gestión de los elementos gráficos del SIG están escritos en el lenguaje de programación Avenue, propio del SIG utilizado. Los elementos gráficos utilizados comprenden polígonos, líneas y puntos.

La malla base utilizada para EMICAT2000 (272 km x 272 km), se estructura con 73 984 elementos poligonales de 1 km².

Los mapas de usos del suelo, de temperatura y de radiación solar se gestionan mediante la asignación de un valor a cada elemento poligonal. Los tramos de los ejes de las vías (IMD constante) se estructuran con elementos lineales, que se dividen mediante la superposición de la malla base. Las emisiones del tráfico vehicular de cada elemento poligonal de la malla base se obtiene como la suma de las emisiones de los respectivos segmentos de vía que contiene. Las fuentes de emisión industrial se gestionan como elementos puntuales. Todos los mapas de emisión se conforman mediante la asignación numérica a cada polígono de la malla base.

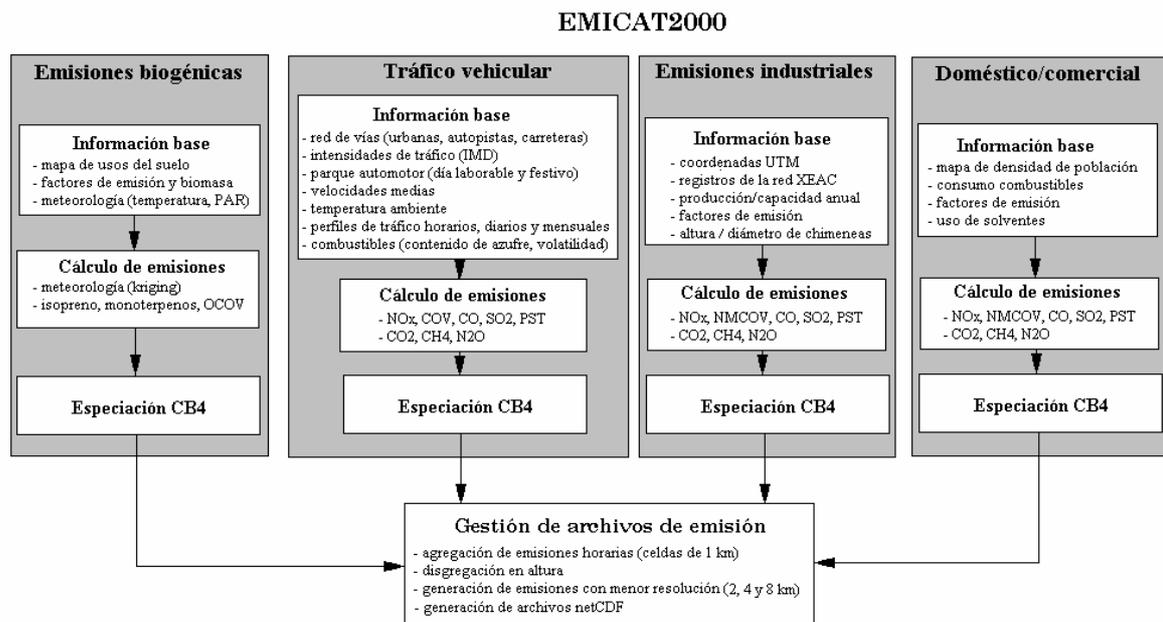


Figura 8.1: Estructura del modelo de emisiones EMICAT2000

La organización informática de EMICAT2000 es flexible, de modo que la actualización de cualquiera de los elementos de la información base o de los algoritmos de cálculo, es sencilla. La Figura 8.2 presenta el entorno de trabajo de EMICAT2000.

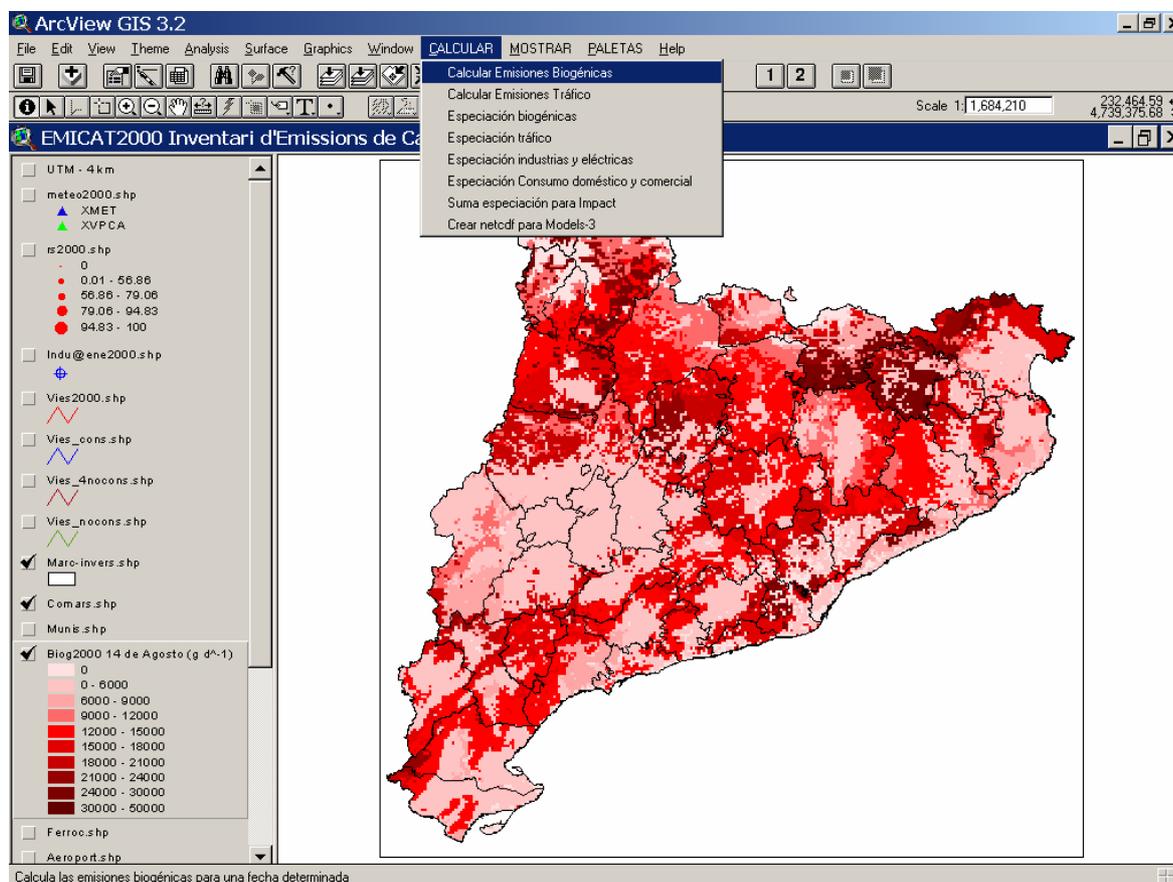


Figura 8.2: Entorno de trabajo de EMICAT2000

8.2 Emisiones en capas verticales

Las emisiones especiadas se localizan en capas verticales, considerando los siguientes criterios:

- Emisiones biogénicas, capa en superficie.
- Emisiones del tráfico vehicular, capa en superficie.
- Emisiones industriales fugitivas, capa en superficie.
- Emisiones industriales de combustión, la capa que resulte de considerar la altura de la chimenea y la resolución vertical adoptada para simulación fotoquímica.
- Emisiones de los sectores residencial y comercial: capa en superficie.

8.3 Archivos netCDF de las emisiones horarias

Como paso previo al uso de la información sobre las emisiones en el MTQ, EMICAT2000 organiza la lista larga de emisiones horarias especiadas, en un archivo de texto que tiene en dos secciones diferenciadas:

- ❑ Una cabecera, que indica la información general sobre el dominio de análisis, así como el número de filas, columnas, capas y especies químicas que se incluyen en la simulación.
- ❑ El bloque de datos propiamente dicho, con los valores de emisión especiados por celda y por capa.

El bloque de datos es el componente con mayor cantidad de información numérica y se estructura según la interfaz *netCDF* (*network Common Data Form*). Su elaboración sólo es práctica mediante el uso de un programa informático auxiliar que realice el postproceso de la información.

La malla tridimensional del dominio se define mediante el número de filas (*ROW*), columnas (*COL*) y capas (*LAY*). La Figura 8.3 indica la disposición de las filas y columnas en el plano XY. Los índices cumplen las siguientes relaciones:

- ❑ Filas: $i + 1 = \text{ROW}$.
- ❑ Columnas: $j + 1 = \text{COL}$.
- ❑ Capas: $k + 1 = \text{LAY}$.

Siendo:

- i: índice de filas, varía entre 0 y “ROW – 1”.
- j: índice de columnas, varía entre 0 y “COL – 1”.
- k: índice de capas, varía entre 0 y “LAY – 1”.

Por ejemplo, si se trabajara con un dominio de 30 columnas ($\text{COL} = 30$), 20 filas ($\text{ROW} = 20$) y 10 capas ($\text{LAY} = 10$); entonces la variación de los índices serán de la siguiente manera:

- ❑ i (índice de filas), desde 0 hasta 19.
- ❑ j (índice de columnas), desde 0 hasta 29
- ❑ k (índice de capas), desde 0 hasta 9.

El origen del sistema de referencia coincide con la esquina inferior izquierda de la celda (0,0). En la Figura 8.3, la emisión horaria para la celda ubicada en la columna m y en la fila n, se denomina como “ e_{nm} ”. Por ejemplo, la emisión de CO (moles h^{-1}) en la celda ubicada en la columna 2 y fila 1 se denomina “ e_{12} ”.

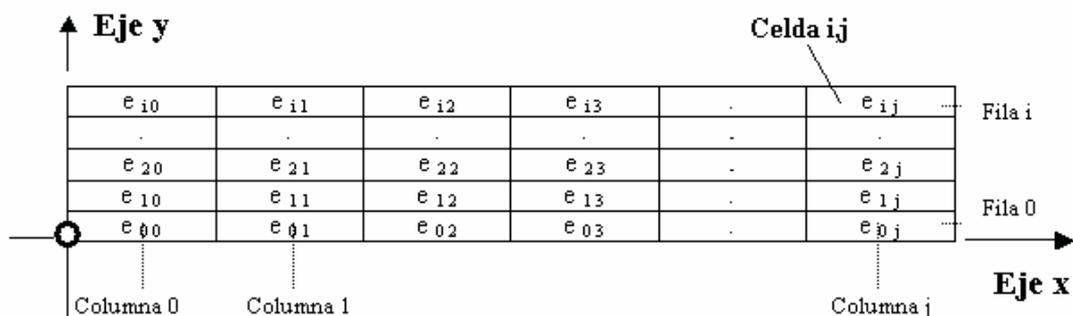


Figura 8.3: Configuración de filas y columnas del sistema de referencia para el archivo de emisiones.

Hay un bloque de datos para cada especie considerada en la simulación. Así por ejemplo, si se trabajara con las especies ISOP, NO2 y TOL, la configuración global sería la presentada en la Figura 8.4. Los textos en negrita indican lo que debe contener el archivo de texto. “Data:” indica el inicio del bloque de datos. El signo “}” indica el fin del archivo.

```

Data:
ISO =
.
.
.
NO2 =
.
.
.
TOL =
.
.
.
}
    
```

Figura 8.4: Ejemplo de configuración general del bloque de los datos de emisión por especie.

Para cada especie, la información se organiza por horas, según lo indicado en la Figura 8.5. Para cada hora, la información se organiza por capas (ver la Figura 8.6). Para cada capa, la información se organiza en filas (ver la Figura 8.7).

```

ISOP =
bloque de información de la hora 0
bloque de información de la hora 1
.....
.
.
bloque de información de la última hora
    
```

Figura 8.5: Organización de la información para una especie por horas.

```

bloque de información de la capa 1
bloque de información de la capa 2
....
bloque de información de la capa LAY
    
```

Figura 8.6: Organización de la información para una especie por capas.

```

bloque de información de la fila 1
bloque de información de la fila 2
.....
bloque de información de la fila ROW
    
```

Figura 8.7: Organización de la información para una especie por filas.

Cada fila de datos termina con una coma “,”.

Siguiendo la nomenclatura de Figura 8.3, los datos por filas se estructuran según lo indicado en la Figura 8.8.

```

e 0 0, e 0 1, e 0 2, e 0 3, .....e 0 j,
e 1 0, e 1 1, e 1 2, e 1 3, .....e 1 j,
e 2 0, e 2 1, e 2 2, e 2 3, .....e 2 j,
.....
.....
e i 1, e i 2, e i 3, .....e i j,
    
```

Figura 8.8: Organización de la información para una especie por filas.

Al final de la información de cada especie se debe incluir el signo de punto y coma “;” y se pueden ingresar comentarios luego del signo “//” en la fila correspondiente.

Como ejemplo se presenta el texto de entrada para un dominio de análisis con 4 columnas, 3 filas y 2 capas, con datos de emisión horaria para 3 horas, para las especie ISOP y CO. Las emisiones de ISOP en la primera capa son iguales a 0.6 mol h⁻¹ (en todas las celdas) para la hora 0, 0.5 mol h⁻¹ para la hora 1 y 0.4 mol h⁻¹ para la hora 2. Las emisiones de ISOP para todas las horas en la segunda capa son iguales a 0. Las emisiones de CO son iguales a 0.3 mol h⁻¹ para todas las horas en la primera capa y 0 para la segunda. La Figura 8.9 indica la conformación del bloque de datos; el mismo que debe colocarse a continuación de los datos de cabecera.

El archivo de texto así obtenido luego debe ser transformado a formato binario, para su posterior uso en Models-3.

```
Data:
ISO =
// hora 0, capa 0
0.6, 0.6, 0.6, 0.6,
0.6, 0.6, 0.6, 0.6,
0.6, 0.6, 0.6, 0.6,
// hora 0, capa 1
0,0,0,0,
0,0,0,0,
0,0,0,0,
// hora 1, capa 0
0.5, 0.5, 0.5, 0.5,
0.5, 0.5, 0.5, 0.5,
0.5, 0.5, 0.5, 0.5,
// hora 1, capa 1
0,0,0,0,
0,0,0,0,
0,0,0,0,
// hora 2, capa 0
0.4, 0.4, 0.4, 0.4,
0.4, 0.4, 0.4, 0.4,
0.4, 0.4, 0.4, 0.4,
// hora 2, capa 1
0,0,0,0,
0,0,0,0,
0,0,0,0;
CO =
// hora 0, capa 0
0.3, 0.3, 0.3, 0.3,
0.3, 0.3, 0.3, 0.3,
0.3, 0.3, 0.3, 0.3,
// hora 0, capa 1
0,0,0,0,
0,0,0,0,
0,0,0,0,
// hora 1, capa 0
0.3, 0.3, 0.3, 0.3,
0.3, 0.3, 0.3, 0.3,
0.3, 0.3, 0.3, 0.3,
// hora 1, capa 1
0,0,0,0,
0,0,0,0,
0,0,0,0,
// hora 2, capa 0
0.3, 0.3, 0.3, 0.3,
0.3, 0.3, 0.3, 0.3,
0.3, 0.3, 0.3, 0.3,
// hora 2, capa 1
0,0,0,0,
0,0,0,0,
0,0,0,0;
}
```

Figura 8.9: Ejemplo de bloque de datos de emisión

8.4 Archivos de emisión con menor grado de resolución espacial

A fin de proporcionar los datos con resoluciones espaciales menores, en EMICAT2000 se implementó la opción de agregación de las emisiones para dominios con celdas cuadradas de 2, 4 y 8 km de lado. Las emisiones de las celdas con menor grado de resolución integran los valores de las celdas de menor tamaño emplazadas dentro de las mismas; es decir, una celda de 8 km tiene como valor de emisión, la suma de los valores de las 64 celdas de que se emplazan dentro de la misma. Por lo tanto, los niveles de emisión en toda la zona de estudio que se obtienen de cada mapa con diferente resolución espacial, son iguales.

Como ejemplo, la Figura 8.10 y la Figura 8.11 presentan los mapas de emisión de la categoría PAR (enlace parafínico) durante las 12 horas del 15 de agosto, para Cataluña y el Área Metropolitana de Barcelona. Se observa claramente la pérdida de resolución y detalle de las emisiones al ir pasando de los mapas de menor a mayor resolución. Los ejes de las vías son nítidos en los mapas a 1 y 2 km.

Actualmente, los MTQ asumen que las emisiones horarias se distribuyen uniformemente (las concentraciones son iguales) en cada uno de los volúmenes que conforman la malla tridimensional. Esto implica que las altas emisiones que aparecen en los mapas de mayor resolución (por ejemplo, en las celdas en donde se emplazan chimeneas), puedan atenuarse excesivamente en los mapas de menor resolución espacial, afectando por tanto los resultados de la modelización fotoquímica.

Con una mayor resolución espacial de las emisiones, a cambio de un mayor coste computacional y temporal, el detalle de los resultados de la simulación fotoquímica normalmente es mejor. Con mapas de menor resolución, los resultados serán menos definidos pero los recursos utilizados serán menores. La selección del nivel de discretización adecuado se define en función de los objetivos de la modelización. Así, en estudios completos de detalle a nivel local, se puede justificar el uso de altas resoluciones; en tanto que en aplicaciones, como el pronóstico de eventos de contaminación por ozono en tiempo real; en donde la variable tiempo es crucial, puede ser suficiente asumir una resolución más baja.

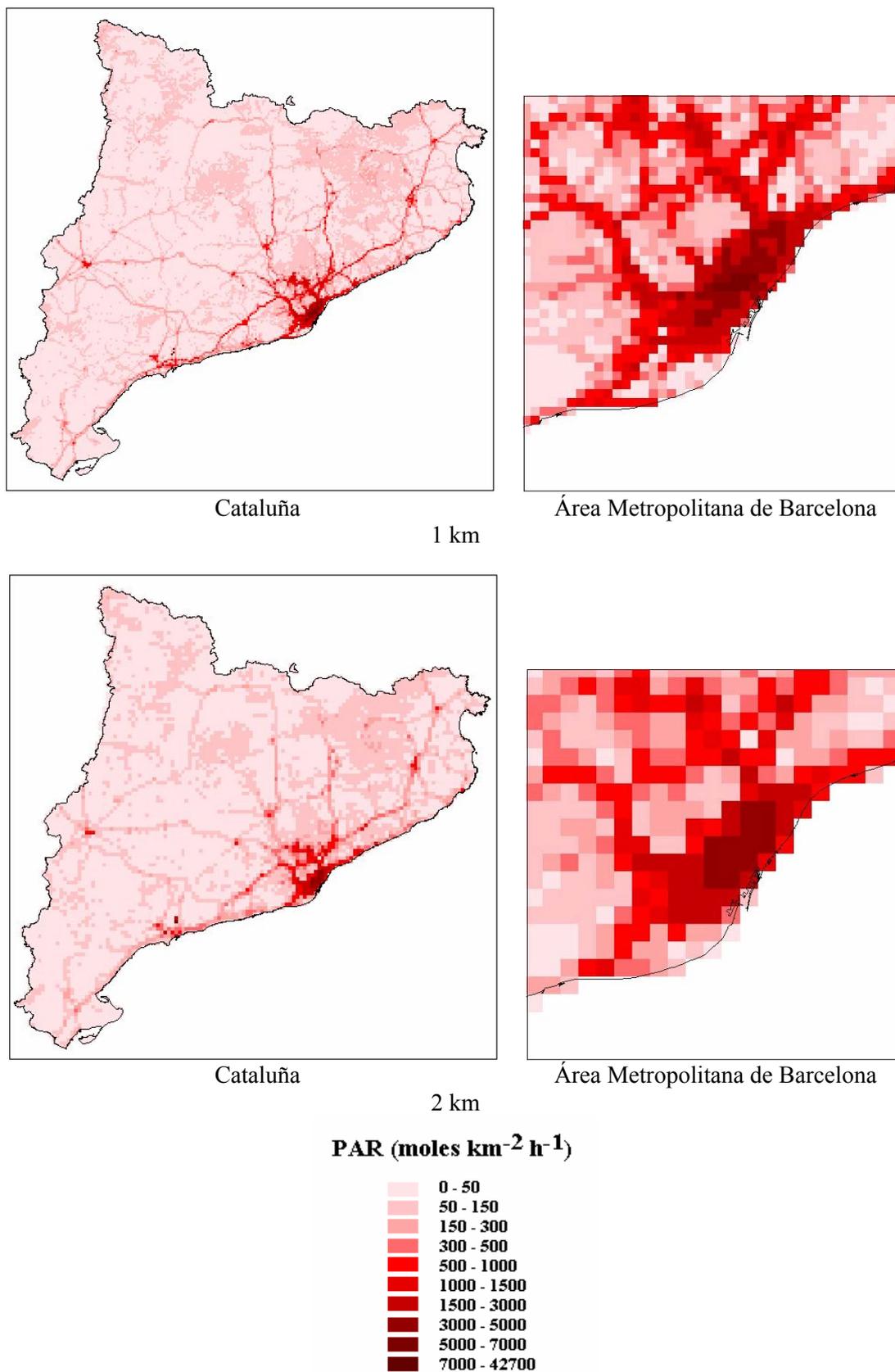


Figura 8.10: Emisiones de la categoría PAR (enlace parafínico) para las 12 horas del día 15 de agosto de 2000, con celdas de 1 y 2 km.

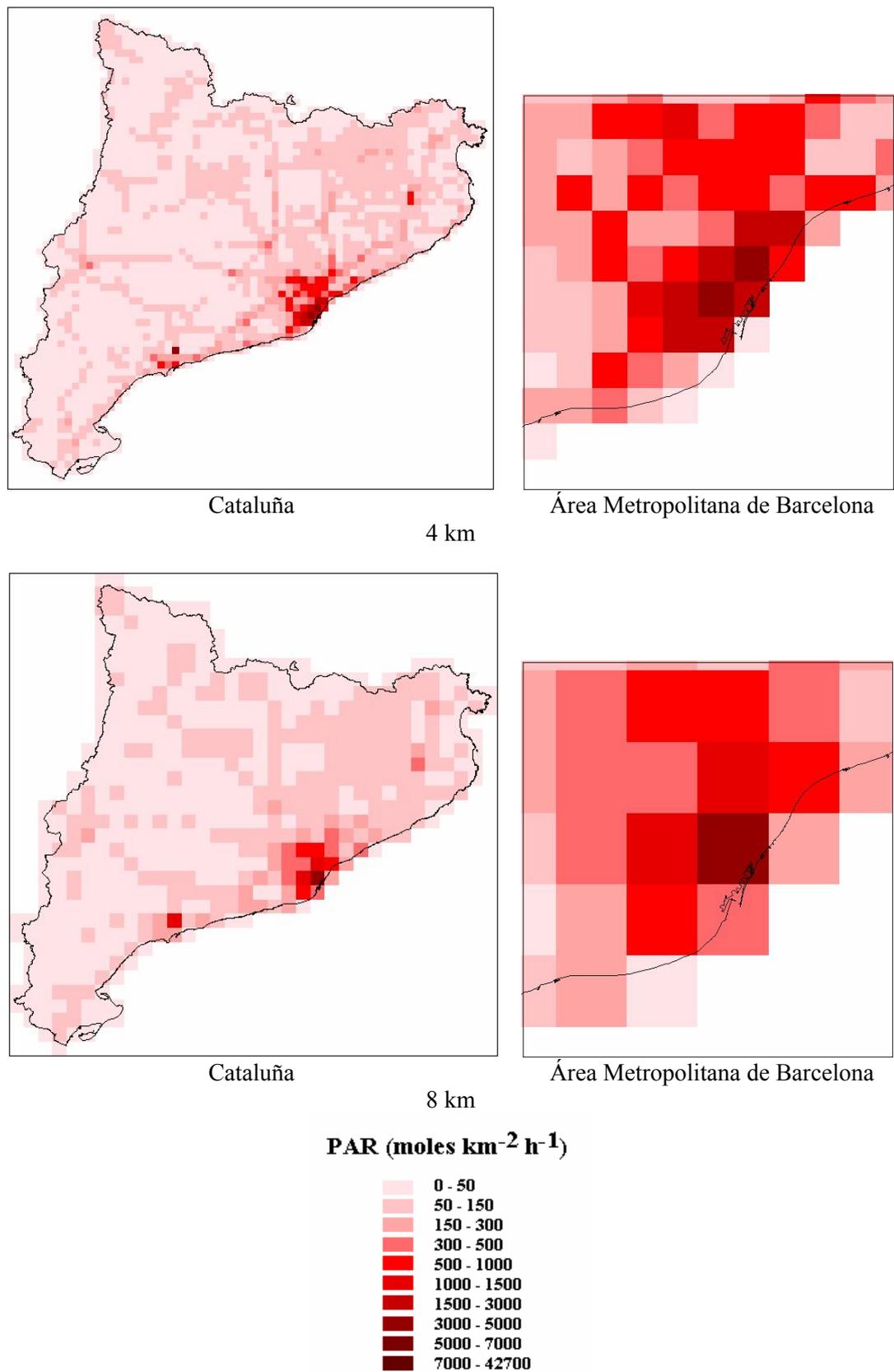


Figura 8.11: Emisiones de la categoría PAR (enlace parafínico) para las 12 horas del día 15 de agosto de 2000, con celdas de 4 y 8 km.

8.5 Emisiones para las condiciones iniciales y de contorno

Las condiciones iniciales y de contorno para Cataluña (o cualquier zona de la Península Ibérica) se pueden obtener a partir de la simulación fotoquímica sobre una zona de estudio que incluye a toda la Península Ibérica, la zona sur de Francia y la parte norte de África (ver la Figura 8.12). La malla externa está compuesta por 46 filas y 58 columnas de celdas de aproximadamente 24 km de lado. Esta malla se define por sus vértices, según las coordenadas (en metros) que se indican a continuación (proyección: Lambert Conformal Conic, esferoide: spheroid, meridiano central: 2.4, latitud de referencia: 41, paralelo estándar 1: 30, paralelo estándar 2: 60):

- ❑ E: -1 020 159.4, - 624 098
- ❑ F: -1 020 158.7, 480 075
- ❑ G: 372 058, 480 075
- ❑ H: 372 058, - 624 097

La malla interna corresponde al dominio de análisis presentado en el Capítulo 2.

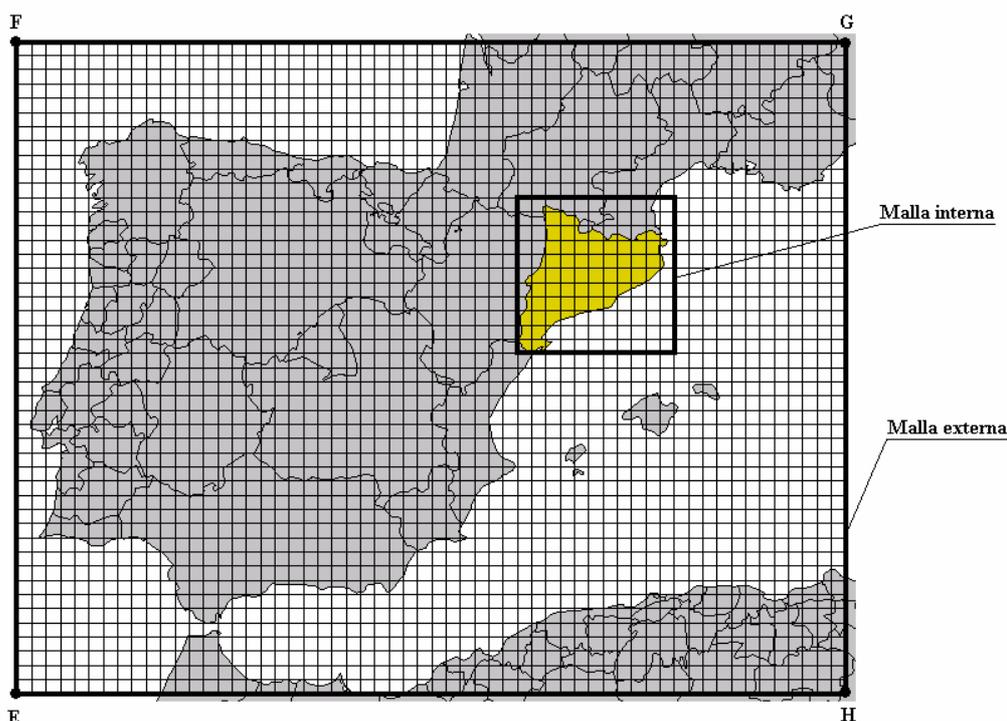


Figura 8.12: Dominio de análisis para la generación de las condiciones iniciales y de contorno

Las emisiones horarias para la malla externa se obtienen a partir de las emisiones EMEP (NO_x , NMCOV, SO_x y CO) para el año 2000 (EMEP, 2003), mediante el siguiente procedimiento:

- ❑ Obtención de las emisión mensual. Mediante la aplicación de un grupo de coeficientes (EMEP, 2003) propuesto para cada país y para cada uno de los 11 sectores que conforman las emisiones EMEP. La Figura 8.13 indica estos coeficientes que corresponden a España.
- ❑ Obtención de las emisiones diarias. Mediante la aplicación de coeficientes por país y para cada sector que conforman las emisiones EMEP. La Figura 8.14 indica los coeficientes diarios para España.

- ❑ Obtención de las emisiones horarias. Mediante la aplicación de un perfil de coeficientes por cada tipo de sector de emisión EMEP (ver la Figura 8.15).
- ❑ Especiación de las emisiones para el mecanismo químico CB4, según los criterios que se indican más adelante.
- ❑ Distribución vertical de las emisiones horarias especiadas, según los porcentajes indicados en la Tabla 8.1.

Las emisiones horarias especiadas se obtienen a partir de las emisiones horarias, mediante la aplicación de la Ecuación 8.1:

$$E_{eij} = \frac{E_{ei} \cdot \text{Factor}_{eij} \cdot \text{RtT}_e \cdot 1000000}{\text{Pmol}_i} \quad 8.1$$

Siendo:

- E_{eij} : emisión (moles h^{-1}) de la categoría j del mecanismo CB4, producida por el contaminante i (CO, NO_x, SO_x, NMCOV), de la categoría EMEP e (1, 2,...,11).
- E_{ei} : emisión (t h^{-1}) del contaminante i (CO, NO_x, SO_x, NMCOV), de la categoría EMEP e (1, 2,...,11).
- Factor_{eij} : factor de transformación para la categoría j del mecanismo CB4, que corresponde al contaminante i de las emisiones del sector EMEP e (ver las tablas 7-2, 7-3 y 7.4).
- RtT_e : factor de transformación de las emisiones del sector EMEP e , para incorporar el CH₄ a las emisiones de NMCOV. Corresponde al valor denominado "ROG to TOG" en los perfiles de especiación propuestos por la USEPA (USEPA, 2003). Para el CO, NO, NO₂ y SO₂; este parámetro debe tomarse igual a 1.
- Pmol_i : peso molecular del contaminante i (g). Aplicable solamente para el caso del CO, NO, NO₂ y SO₂; según los valores de la Tabla 8.2. Para los NMCOV este parámetro debe tomarse igual a 1.

La Tabla 8.2 indica los valores de Factor_{eij} y Pmol_i , que definen los perfiles de especiación, para las emisiones de CO, NO_x y SO_x. La Tabla 8.3 y la Tabla 8.4 indican los valores de Factor_{eij} y de RtT_e que definen los perfiles de especiación seleccionados para las emisiones de NMCOV.

El perfil de especiación para el sector 7 (tráfico vehicular), se obtuvo a partir de los perfiles presentados en el Capítulo 4, aplicando en su orden, pesos del 57 %, 3 %, 32 %, 2 % y 6 %; que corresponden al aporte según los cinco perfiles de especiación, para la composición de las emisiones de COV del año 2000 debido al tráfico vehicular en Cataluña.

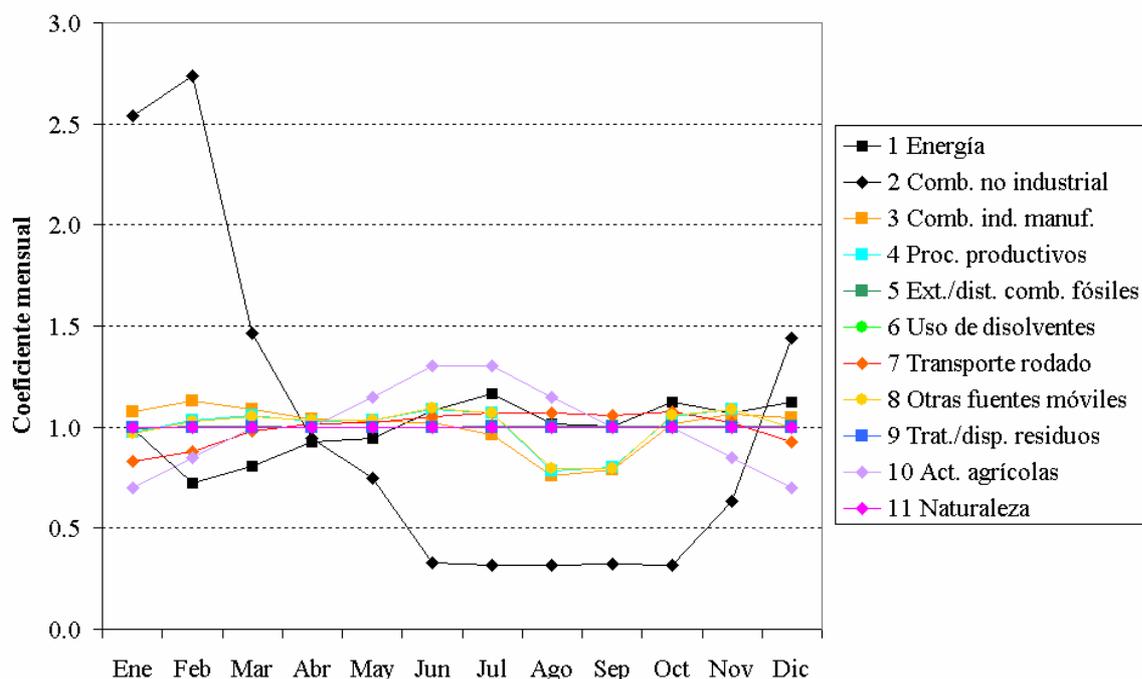


Figura 8.13: Coeficientes de desagregación mensual de las emisiones EMEP del año 2000 para España. (EMEP, 2003).

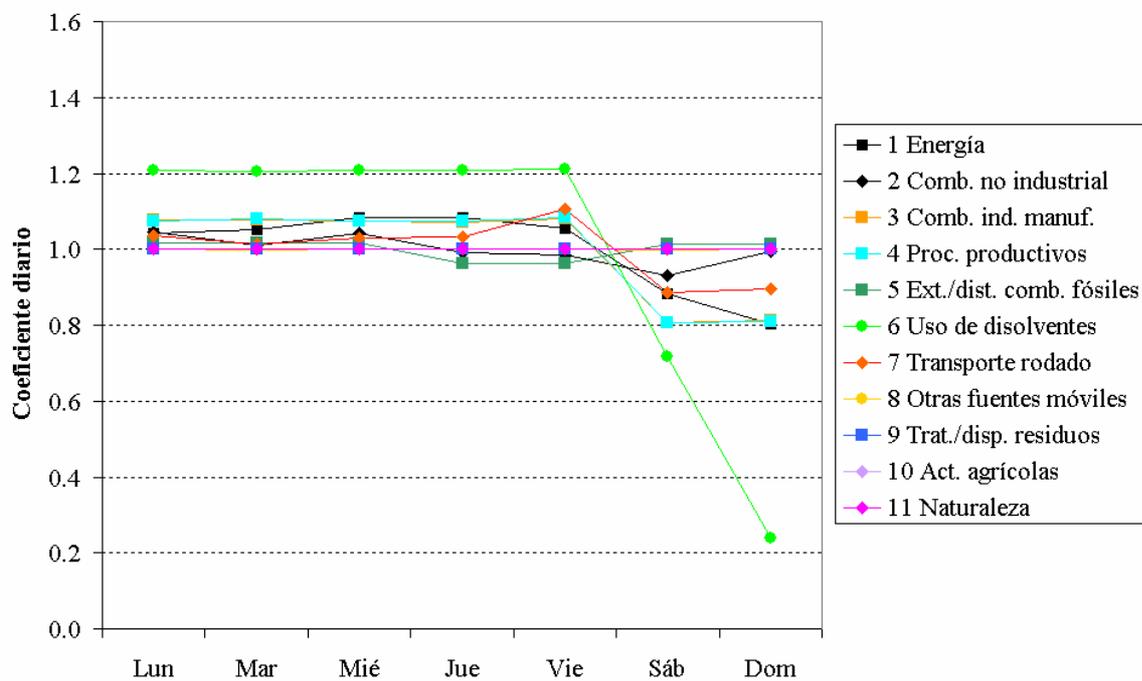


Figura 8.14: Coeficientes de desagregación diaria para las emisiones EMEP del año 2000 para España (EMEP, 2003).

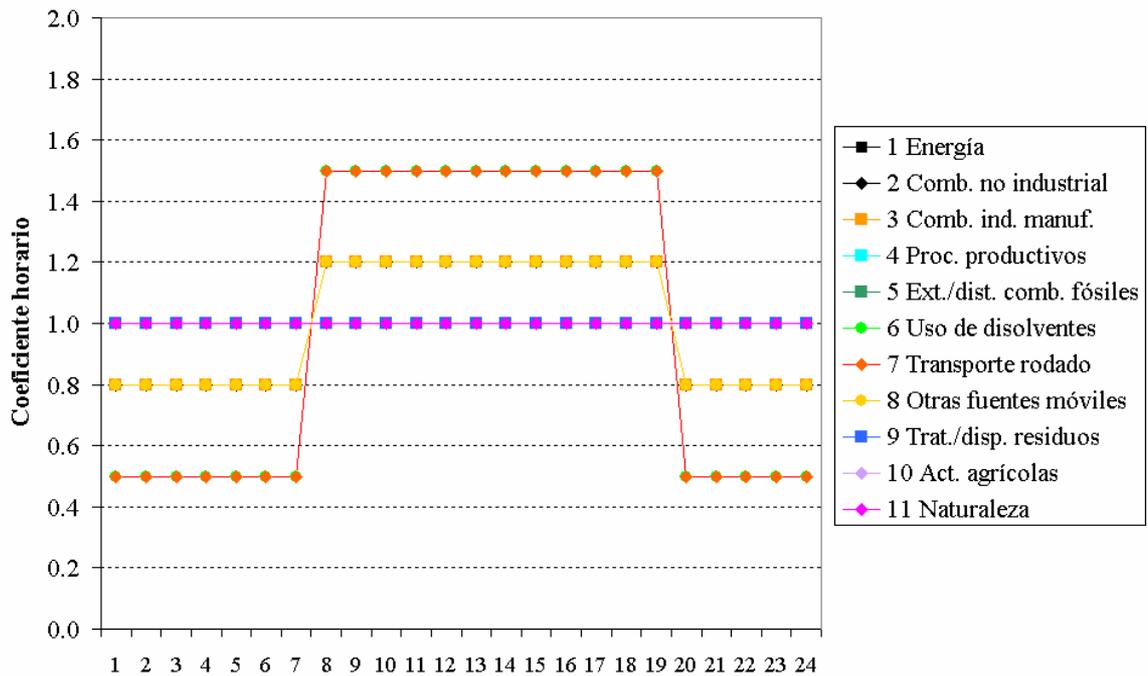


Figura 8.15: Coeficientes de desagregación horaria para las emisiones EMEP del año 2000 (EMEP, 2003).

Tabla 8.1: Porcentajes de distribución vertical de las emisiones EMEP por sectores (EMEP, 2003).

Sector EMEP	Altura (m)		
	Superficie	150	250
1 Energía.	10 %	20 %	70 %
2 Combustión no industrial.	50 %	50 %	-
3 Combustión industria manufacturera.	50 %	50 %	-
4 Procesos productivos.	90 %	10 %	-
5 Extracción/distribución combustibles fósiles.	90 %	10 %	-
6 Uso de disolventes.	100 %	-	-
7 Transporte rodado.	100 %	-	-
8 Otras fuentes móviles.	100 %	-	-
9 Tratamiento y disposición de residuos.	80 %	20 %	-
10 Actividades agrícolas.	100 %	-	-
11 Naturaleza (otras fuentes y sumideros).	100 %	-	-

Tabla 8.2: Valores de los parámetros $Factor_{eij}$ y $Pmol_i$ para la especiación de las emisiones horarias EMEP de CO, NO_x y SO_x.

Sector	$Factor_{eij}$				$Pmol_i$			
	CO	NO	NO2	SO2	CO	NO	NO2	SO2
1	1	0.62	0.05	1	28	30	46	64
2	1	0.62	0.05	1	28	30	46	64
3	1	0.62	0.05	1	28	30	46	64
4	1	0.586 9	0.1	1	28	30	46	64
5	1	0.586 9	0.1	1	28	30	46	64
6	No aplicable				No aplicable			
7	1	0.62	0.05	1	28	30	46	64
8	1	0.62	0.05	1	28	30	46	64
9	1	0.62	0.05	1	28	30	46	64
10	1	0.586 9	0.1	1	28	30	46	64
11	1	0.586 9	0.1	1	28	30	46	64

Tabla 8.3: Valores de los parámetros $Factor_{eij}$ y RtT_e para la especiación de las emisiones horarias EMEP de NMCOV, para las categorías FORM, NR, PAR y TOL.

Sector EMEP	RtT_e	FORM	NR	PAR	TOL
1	1.735	0.008 325 008 5	0.022 636 952	0.023 933 859	0.000 108 530 5
2	1.735	0.008 325 008 5	0.022 636 952	0.023 933 859	0.000 108 530 5
3	1.735	0.008 325 008 5	0.022 636 952	0.023 933 859	0.000 108 530 5
4	1	0.000 524 689	0.012 918 473	0.026 979 413	0.000592 541
5	1.12	0	0.030 111 756	0.036 440 673	0
6	1.03	0.000 489 51	0.004 516 182	0.027 709 807	0.000 721 613
7	1	0.000 284 31	0.004 926 21	0.036 115 4	0.001 685 810
8	1	0.001 683 6	0.003 627 8	0.045 474 9	0.000 189 4
9	83.33	0	0.061 041 733 59	0.001 068 438	0.000 010 853 05
10	1	0.000 524 689	0.012 918 473	0.026 979 41 3	0.000 592 541
11	Proceso de especiación, según lo indicado en el Capítulo 4, apartado 4.9.				

1: Corresponde a un perfil promedio de los perfiles de especiación 10100601 (*electrical generation, natural gas*) y 10100401 (*electrical generation, residual oil*) propuesto por la EPA (USEPA, 2003).

2, 3: Corresponde al mismo perfil utilizado para el sector 1.

4: Perfil 0 (aplicable a *industrial processes*) (USEPA, 2003).

5: Perfil 1011(*oil and gas production, crude oil production*) (USEPA, 2003).

6: Perfil 9028 (*solvent utilization*) (USEPA, 2003).

7: Perfil deducido en función de la composición de las emisiones de COV presentadas en el Capítulo 4.

8: Perfil para las emisiones del escape de los turismos diesel presentado en el Capítulo 5, Tabla 5.50

9: Perfil 202 (*waste disposal, treatment and recovery, landfills, municipal*) (USEPA, 2003)

10: Perfil 0 (aplicable a *agricultural production - livestock*) (USEPA, 2003).

Tabla 8.4: Valores del parámetro $\text{Factor}_{\text{eij}}$ para la especiación de las emisiones horarias EMEP de NMCOV, de las categorías ALD2, ETH, OLE, XYL e ISOP.

Sector EMEP	ALD2	ETH	OLE	XYL	ISOP
1	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0
4	0.000 763 079	0.001 289 176	0.001 898 605	0.000 398 111	0.000 058 720
5	0	0	0	0	0
6	0.001 688 332	0.000 566 755	0.002 569 395	0.000 624 344	0.000 215 796
7	0.001 125 8	0.000 868 21	0.001 779 06	0.001 444 35	0
8	0.002 979 9	0.001 539 1	0.001 668 1	0.000 282	0
9	0	0	0.000 007 340	0.000 009 419	0
10	0.000 763 079	0.001 289 176	0.001 898 605	0.000 398 111	0.000 058 720
11	Proceso de especiación, según lo indicado en el Capítulo 3.				

1: Corresponde a un perfil promedio de los perfiles de especiación 10100601 (*electrical generation, natural gas*) y 10100401 (*electrical generation, residual oil*) propuesto por la EPA (USEPA, 2003).

2, 3: Corresponde al mismo perfil utilizado para el sector 1.

4: Perfil 0 (aplicable a *industrial processes*) (USEPA, 2003).

5: Perfil 1011(*oil and gas production, crude oil production*) (USEPA, 2003).

6: Perfil 9028 (*solvent utilization*) (USEPA, 2003).

7: Perfil deducido en función de la composición de las emisiones de COV presentadas en el Capítulo 4.

8: Perfil para las emisiones del escape de los turismos diesel presentado en el Capítulo 5, Tabla 5.50

9: Perfil 202 (*waste disposal, treatment and recovery, landfills, municipal*) (USEPA, 2003)

10: Perfil 0 (aplicable a *agricultural production - livestock*) (USEPA, 2003).

No se consideraron las emisiones EMEP de NMCOV del sector 11. Estas emisiones, que corresponden principalmente a NMCOV de la vegetación, se estimaron aplicando el modelo descrito en el Capítulo 3, utilizando la siguiente información base:

- ❑ Mapa de usos del suelo: conformado a partir de los mapas NATLAN 2000 (EEA, 2000) y (USGS, 2003) según el proceso descrito en Pineda *et al.* (2003). Posteriormente este mapa fue adaptado a las 22 categorías del mapa de usos del suelos de Cataluña para el año 1997 (DMA, 2003).
- ❑ Meteorología: los datos de la radiación solar y la temperatura que proporciona la simulación meteorológica del modelo MM5.
- ❑ Factores de emisión y densidad de biomasa foliar: los correspondientes a Cataluña (presentados en el Capítulo 3).

La especiación de las emisiones de NMCOV biogénicos es similar al indicado en el Capítulo 3.

La Figura 8.16 indica la distribución de las emisiones biogénicas del día 15 de agosto de 2000, de la zona seleccionada para la obtención de las condiciones iniciales y de contorno para Cataluña.

La Figura 8.17 indica la distribución de las emisiones de las 12 horas del día 13 de agosto de la especies NO y TOL en superficie y a 150 m de altura.

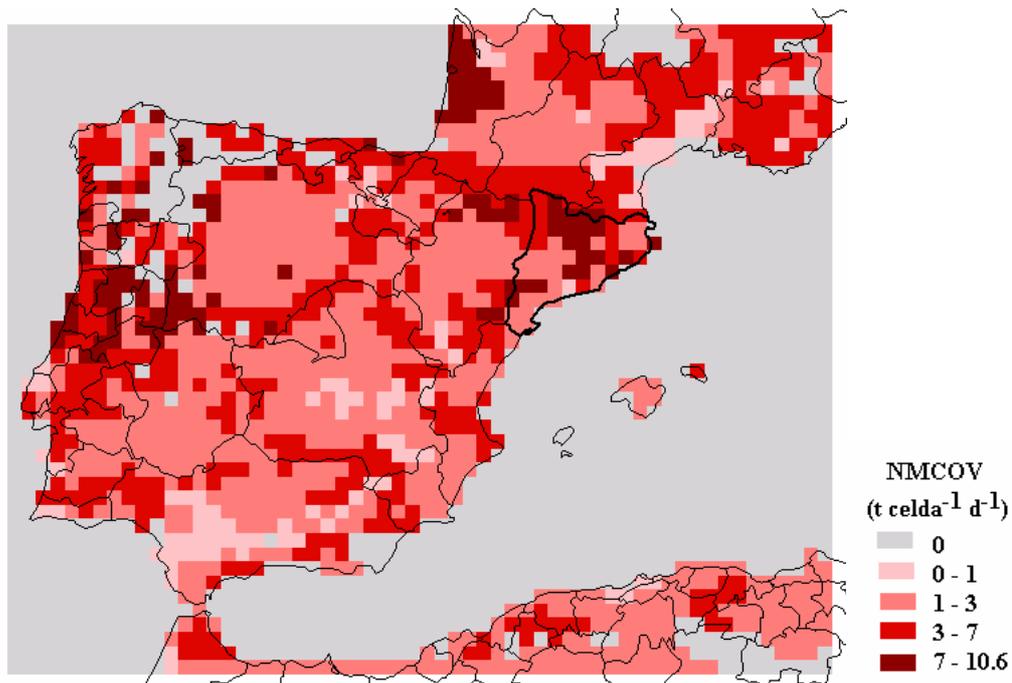


Figura 8.16: Mapa de las emisiones biogénicas del día 15 de agosto de 2000, de la Península Ibérica, norte de África y sur de Francia.

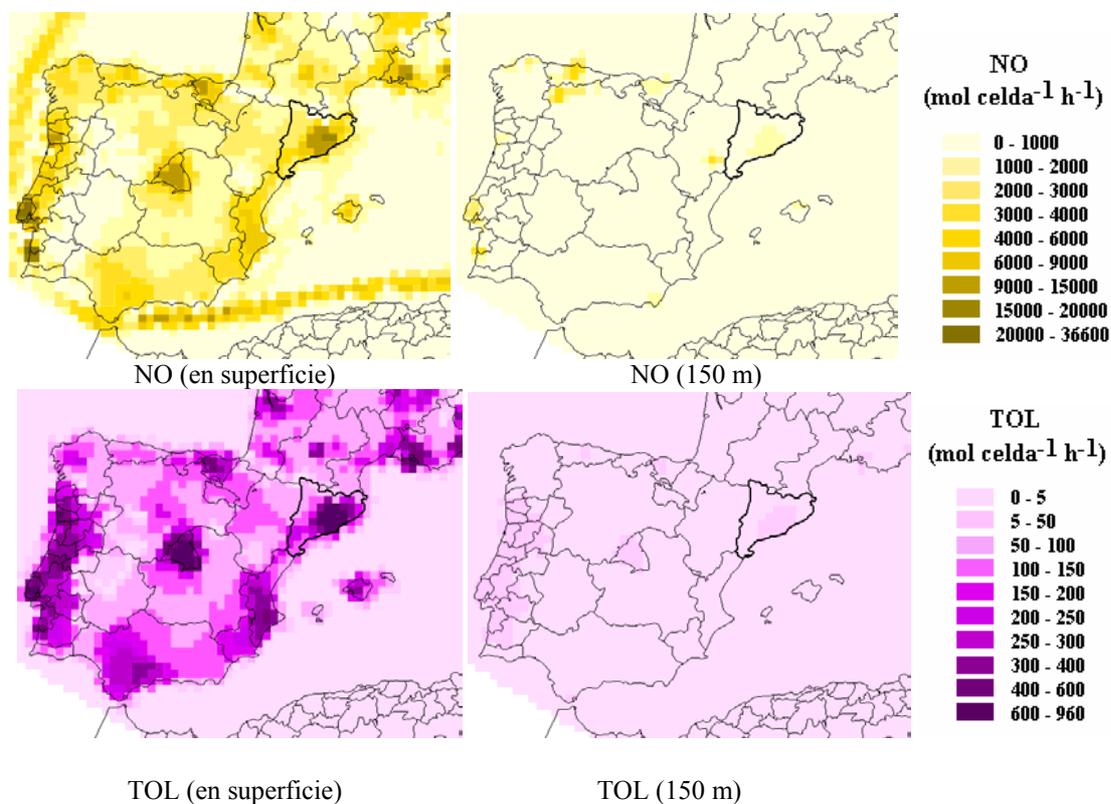


Figura 8.17: Mapas de las emisiones de las 12:00 horas de las categorías NO y TOL del día 13 de agosto de 2000, de la Península Ibérica, norte de África y sur de Francia.