

4t Congrés Qualitat de l'aire

16-17 d'octubre 2025
Fira de Sabadell

Nous paràmetres a la Directiva: com modelitzar-los i incerteses
associades

Oriol Jorba, Barcelona Supercomputing Center



Coorganitzadors:



Ajuntament
de Sabadell



Diputació
Barcelona



Generalitat
de Catalunya



AMB : Àrea Metropolitana
de Barcelona

Nous paràmetres a la Directiva AAQD 2024/2881

- **La nova Directiva de Qualitat de l'Aire Ambient (UE) 2024/2881 requereix la monitorització de nous paràmetres de qualitat de l'aire:**
 - **Carboni negre (Black Carbon)**
 - Partícules ultrafines
 - **Amoníac (NH₃)**
 - **Compostos orgànics volàtils**
 - Potencial oxidatiu
 - Composició del material particulat
 - Altres...
- **Repte General:**
 - **Assegurar que els sistemes de modelització compleixen amb els requisits de qualitat, resolució i adaptabilitat per a la seva modelització.**

Quins paràmetres d'interès ens focalitzàvem fins ara en la modelització

Models regionals:

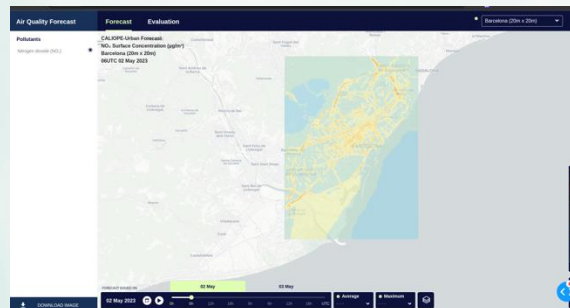
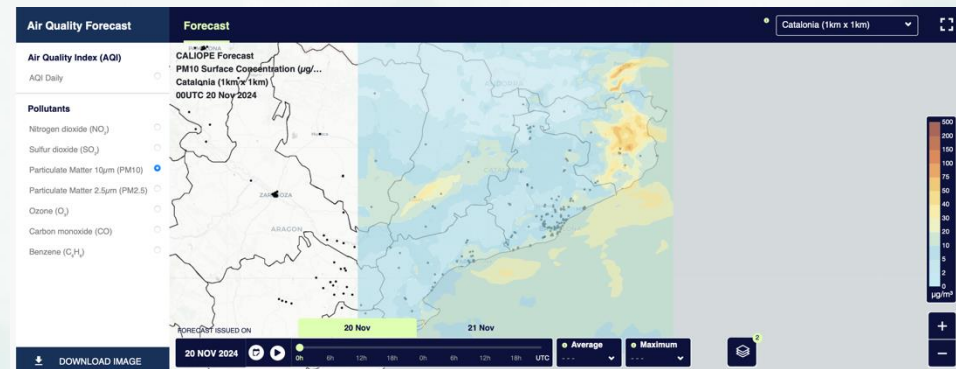
- Ozó troposfèric (O3)
- Diòxid de nitrogen (NO2)
- CO, SO2, Benzè
- Material particulat (PM10 i PM2.5)

Models de carrer:

- NO2 i PM10

Resolució Espacial:

- Depèn del contaminant i del tipus de zona (urbana, rural, industrial). Exemples:
 - PM2.5 en zones urbanes: 100 m - 1 km.
 - NO2 en zones de trànsit intens: <100 m.
 - Fons urbà: 1km



Carbó elemental i Carbó Negre (Black Carbon)

Definició:

- El carbó elemental (EC) fa referència al component carbonaci del material particulat suspès a l'aire que és purament carboni en la seva composició i resistent a la degradació tèrmica o química.
- Sovint s'anomena carbó negre (BC) perquè absorbeix fortament la llum visible i contribueix a l'escalfament atmosfèric.

Què modelitzen en els models numèrics:

- Massa d'aerosols
- Nombre de partícules
- Unitats de concentració: kg kg^{-1} , kg m^{-3} , $\# \text{ m}^{-3}$

Massa vs absorció del carbó negre:

- Aerosols que absorbeixen radiació: carbó negre, carbó marró (aerosol orgànic), aerosol mineral (òxids de ferro de la pols mineral)
- L'absorció és un diagnòstic en el model derivat de la massa i composició dels aerosols a l'atmosfera assumint propietats òptiques concretes (p.ex. Índexs de refracció)

Incerteses:

- Fonts d'emissió: intensitat i geolocalització de les fonts
- Comparació del resultat modelat amb diferents mesures: carbó elemental (mètode de referència EUSAAR-2), carbó negre equivalent (fotòmetres d'absorció de filtres: MAAP, Aethalometres).

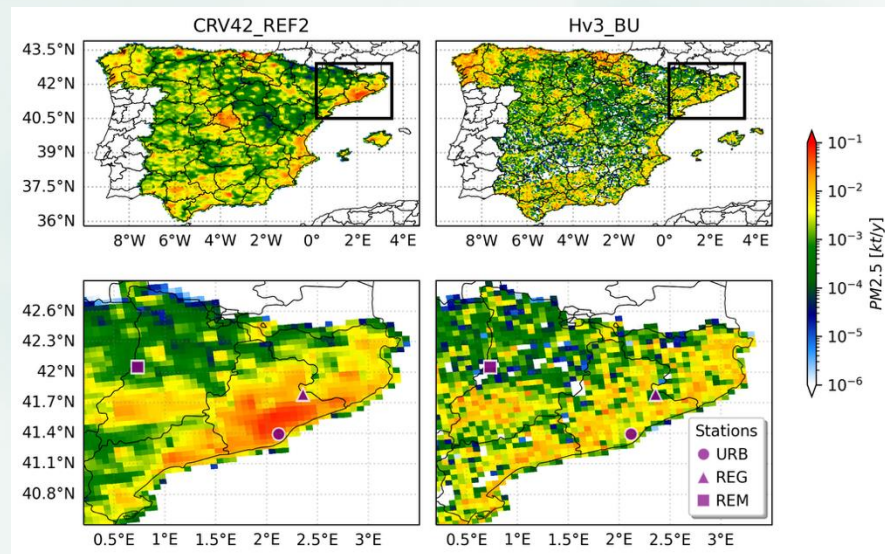
Carbó elemental i Carbó Negre (Black Carbon)

Incerteses en la caracterització de les emissions (exemple de l'ús de biomassa residencial):

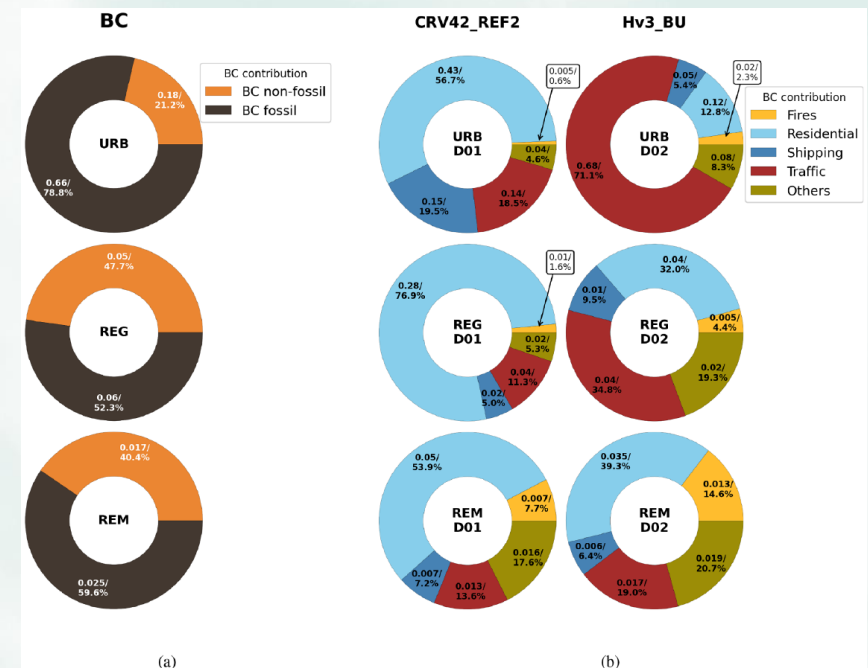
Emissions de PM2.5 del sector Residencial:

Inventari Copernicus

Inventari HERMES_BU BSC



Gener 2018 – Barcelona/Montseny/Montsec



- Emissions Residencials totals PM2.5 consistents entre inventaris a Espanya (50-60 Tg/any)
- Distribució espacial diferent: via densitat de població (copernicus) vs població rural (HERMES)

- Comparació amb contribució de fonts derivada d'observació (mètode Aethalometre)
- Fort impacte en les concentracions a l'atmosfera

L'amoníac i el seu rol en la formació de partícules secundaries

Processos crítics per representar el cicle de vida de l'amoníac a l'atmosfera:

- Fonts d'emissió: agricultura, gestió de residus, indústria, tràfic, naturals
- Deposició de l'amoníac al sòl
- Formació de noves partícules ultrafines: procés de nucleació
- Condensació formant partícules secundàries inorgàniques: sulfat-nitrat-amoni

Emissió i deposició:

- Processos connectats
- S'acostumen a tractar de forma desacoblada en els models
- Processos molt sensibles a les propietats de solubilitat (constant de la llei de Henry H)
- Contingut de Nitrogen del sòl molt rellevant a part d'emissió directa per activitat antropogènica

Partícules ultrafines:

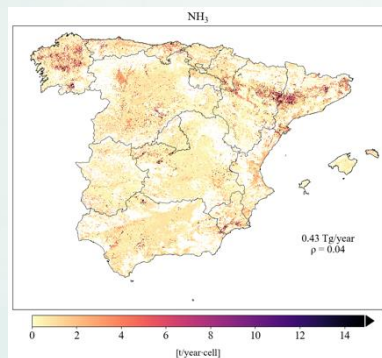
- Esquemes de nucleació: binaria (àcid sulfúric i aigua), ternària (àcid sulfúric, amoníac i aigua), heteromolecular (àcid sulfúric i orgànics)
- Necessitat de caracteritzar la distribució de partícules primàries a l'emissió: mode nucleació (10nm-20nm), mode Aitken (0.01µm-0.1µm), mode acumulació (0.1-2µm), mode gruixut (2-20µm)

Aerosols inorgànics secundaris:

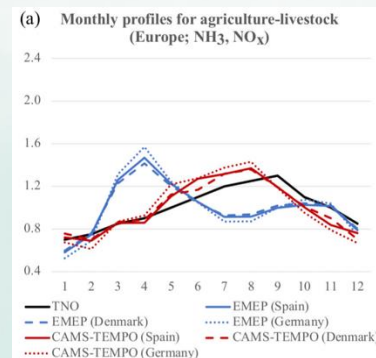
- Diferents aproximacions: partició gas-aerosol irreversible vs reversible
- Rol de l'acidesa i alcalinitat de les partícules

Incerteses en l'emissió i deposició de l'amoniac

Rellevància de la informació d'activitat i distribució temporal de les emissions



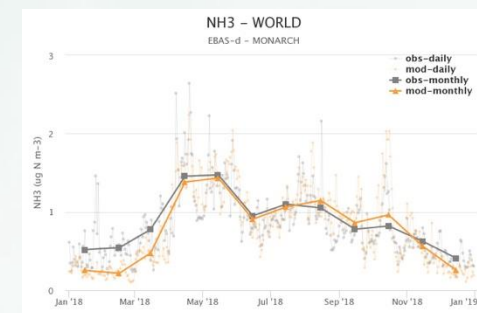
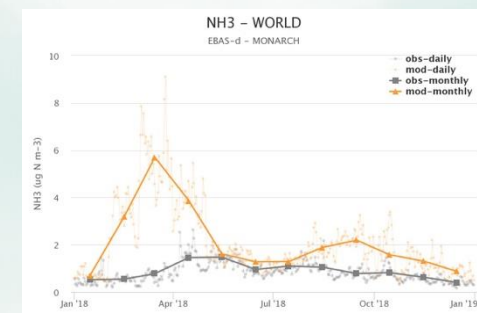
Emissió anual



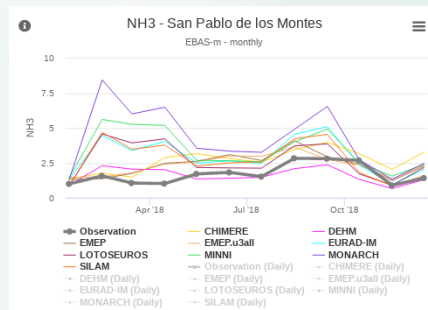
Diferents perfils temporals:
Diferent calendari aplicació fertilitzants

Perfil
específic
Holanda

Perfils per
país



Caracterització propietats de deposició (H* del NH3):

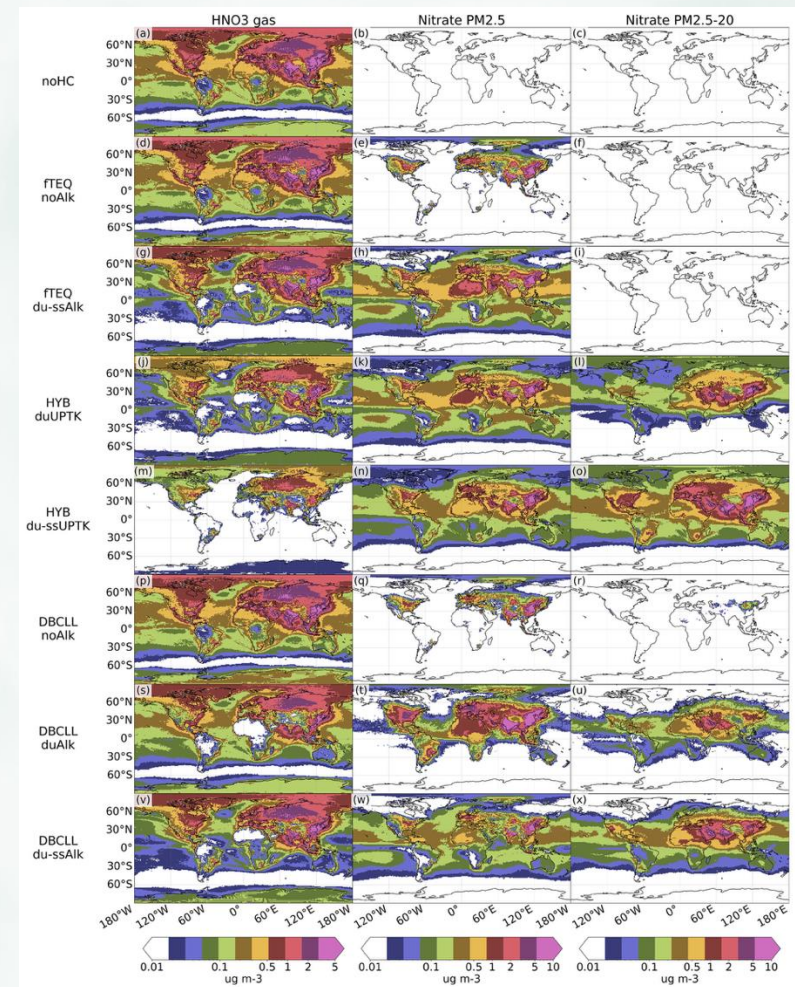
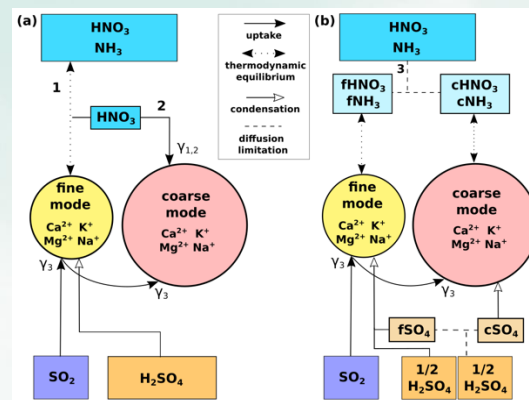


Elevat grau de variabilitat entre
diferents models (esquemes de
deposició)

Diferents aproximacions en la partició gas-aerosol

- Els aerosols inorgànics secundaris (sulfat, nitrat i amoni) es formen mitjançant la conversió de gas a partícula dels gasos precursors SO_2 , HNO_3 i NH_3 .
- Involucra reaccions d'oxidació i neutralització tant en fase gasosa com aquosa.
- Diferents esquemes que impliquen partició irreversible o reversible, i cations no volàtils (p.ex. contingut de calci de la pols mineral).

Irreversible reactions		
Reaction		Process
(R1)	$\text{DU}_{(\text{aer})} + \text{H}_2\text{SO}_{4(\text{g})} \rightarrow \text{SO}_{4(\text{aq})}^{2-}$	Condensation
(R2)	$\text{SS}_{(\text{aer})} + \text{H}_2\text{SO}_{4(\text{g})} \rightarrow \text{SO}_{4(\text{aq})}^{2-}$	Condensation
(R3)	$\text{DU}_{(\text{aer})} + \text{SO}_{2(\text{g})} \rightarrow \text{SO}_{4(\text{aer})}$	UPTK (γ_1)
(R4)	$\text{CaCO}_{3(\text{aer})} + 2\text{HNO}_{3(\text{g})} \rightarrow \text{Ca}(\text{NO}_3)_2(\text{aer}) + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$	UPTK (γ_2)
(R5)	$\text{SS}_{(\text{aer})} + \text{HNO}_{3(\text{g})} \rightarrow \text{NaNO}_3(\text{aer}) + \text{HCl}_{(\text{g})}$	UPTK (γ_3)
Gas-particle equilibrium reactions		
Reaction		Process
(R6)	$\text{HNO}_{3(\text{g})} + \text{NH}_{3(\text{g})} \rightleftharpoons \text{NH}_4^+(\text{aq}) + \text{NO}_3^-(\text{aq})$	TEQ
(R7)	$\text{H}_2\text{SO}_{4(\text{g})} + \text{NH}_{3(\text{g})} \rightleftharpoons \text{NH}_4^+(\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-}(\text{aq})$	TEQ
(R8)	$\text{CaCO}_{3(\text{aq})} + 2\text{HNO}_{3(\text{g})} \rightleftharpoons \text{Ca}^{2+}(\text{aq}) + 2\text{NO}_3^-(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$	TEQ
(R9)	$\text{MgCO}_{3(\text{aq})} + 2\text{HNO}_{3(\text{g})} \rightleftharpoons \text{Mg}^{2+}(\text{aq}) + 2\text{NO}_3^-(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$	TEQ
(R10)	$\text{K}_2\text{CO}_{3(\text{aq})} + 2\text{HNO}_{3(\text{g})} \rightleftharpoons 2\text{K}^+(\text{aq}) + 2\text{NO}_3^-(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$	TEQ
(R11)	$\text{Na}_2\text{CO}_{3(\text{aq})} + 2\text{HNO}_{3(\text{g})} \rightleftharpoons 2\text{Na}^+(\text{aq}) + 2\text{NO}_3^-(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$	TEQ
(R12)	$\text{NaCl}_{(\text{aq})} + \text{HNO}_{3(\text{g})} \rightleftharpoons \text{Na}^+(\text{aq}) + \text{NO}_3^-(\text{aq}) + \text{HCl}_{(\text{g})}$	TEQ



Els compostos orgànics volàtils (COVs): precursors de l'O₃ i l'aerosol orgànic secundari

Definició:

- Compost orgànic capaç de vaporitzar-se fàcilment a temperatura ambient
- Conté carboni (i sovint hidrogen; pot contenir oxigen, nitrogen, sofre o halogens)
- P.ex: benzè, toluè, xilens, terpens, formaldehid

Química atmosfèrica:

- Tenen un rol clau en la capacitat oxidativa de l'atmosfera (radicals OH, ...)
- Són precursors de l'ozó troposfèric
- Condensen formant aerosol orgànic secundari (SOA)
- També contribueixen en la formació de noves partícules via nucleació

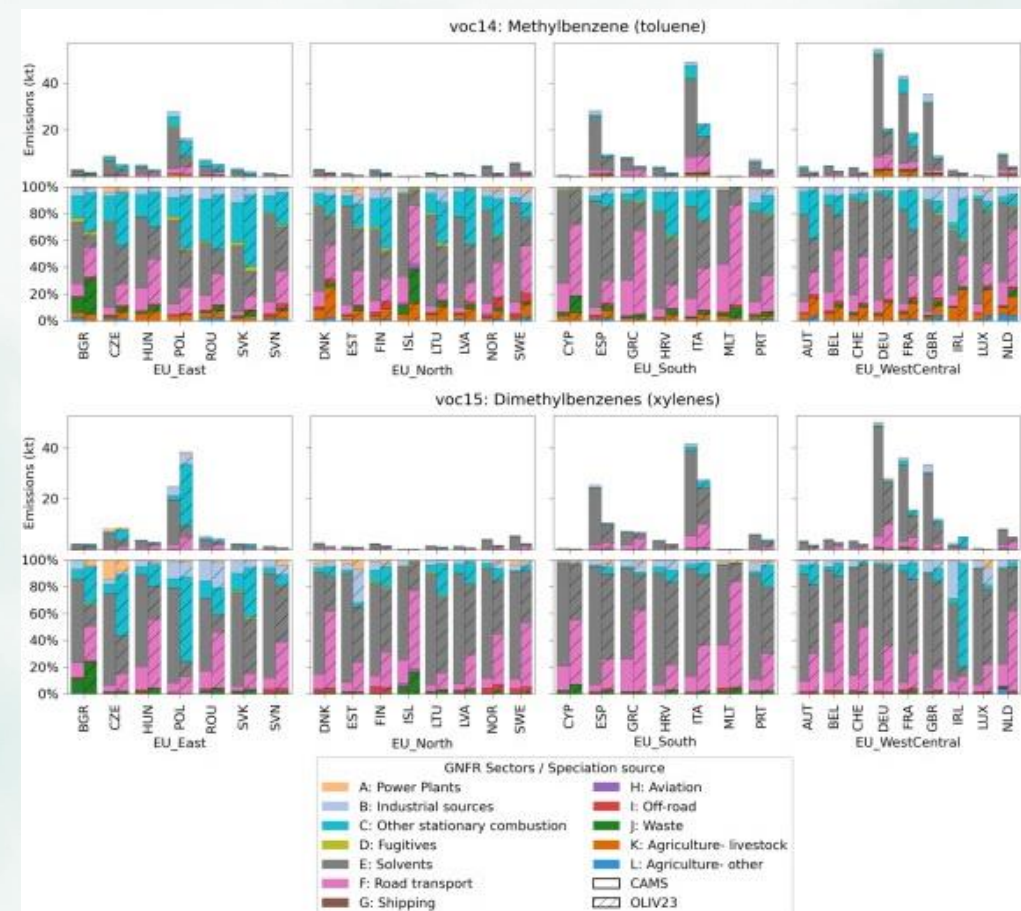
Incerteses en la modelització:

- Mecanismes químics simplificats dissenyats per descriure el cicle de vida del O₃
- Limitacions en representar COVs explícitament
- Parametritzacions simplificades per la formació de SOA
- Elevada incertesa en els perfils d'especiació

Els compostos orgànics volàtils: incertesa en les emissions

Emissions totals antropogèniques a Europa (Toluenes i Xilens):

- Actualització de perfils d'especiació per modelització
(Oliveira et al., 2023)
- Elevada variabilitat per país i COV
- Sectors amb majors diferències: solvents, residencial, tràfic
- Informació disponible basada en estudis poc actuals



Resum

- La modelització de la qualitat de l'aire és essencial per a la implementació de la nova directiva.
- Els models de qualitat de l'aire regionals poden informar sobre alguns dels nous paràmetres de la Directiva (p.ex. Carbó negre, amoníac, composició del material particulat).
- Necessitat de recerca i desenvolupament per a caracteritzar paràmetres més complexos (p.ex. COVs, partícules ultrafines, potencial oxidatiu).
- Les necessitats en modelització i predicció són altament exigents, requerint millores constants, desenvolupaments específics i manteniment a llarg termini.
- Aquestes millores només són possibles amb el suport actiu de les administracions, tant pel que fa a l'accés a dades d'emissions com al finançament necessari.