

Evaluación del rendimiento del sistema de modelización MM5/MNEQA/CMAQ de la calidad del aire para pronosticar las concentraciones de ozono en Cataluña

R. Arasa¹, M. R. Soler¹, S. Ortega², M. Olid¹ y M. Merino¹

¹Departamento de Astronomía y Meteorología, Universitat de Barcelona, Avinguda Diagonal 647, 08028 Barcelona

²Departamento de Física e Ingeniería Nuclear, Universitat Politècnica de Catalunya, C/ Urgell 187, 08036 Barcelona

Recibido: 27-V-2009 – Aceptado: 2-XII-2009 – Versión Traducida

Correspondencia a: rosa@am.ub.es

Resumen

Estudiamos la capacidad de un sistema de modelización para pronosticar la formación y el transporte de ozono sobre Cataluña. Con esta finalidad, el modelo de la Comunidad de Calidad del Aire Multiescalar (CMAQ, de aquí en adelante las siglas se refieren a su versión en inglés, excepto indicación expresa) desarrollado por la Agencia de Protección del Medio Ambiente de los Estados Unidos (US EPA) y el sistema PSU/NCAR de modelización mesoescalar MM5 se asocian con un nuevo modelo de emisión, el Modelo de Emisión Numérico para la Calidad del Aire (MNEQA). Las salidas del sistema de modelización para el período que va de mayo a octubre de 2008 se comparan con las medidas de ozono de estaciones seleccionadas que pertenecen al Departament de Medi Ambient de la Generalitat de Catalunya. Los resultados indican un buen comportamiento del modelo a la hora de reproducir las concentraciones diurnas de ozono, mientras que los valores estadísticos están dentro de los marcos reguladores EPA y UE.

Palabras clave: modelización de la calidad del aire, modelización meteorológica, CMAQ, ozono, evaluación

1 Introducción

Como resultado de las emisiones combinadas de óxidos de nitrógeno y de compuestos orgánicos, se encuentran grandes cantidades de ozono en la capa límite planetaria. El ozono troposférico está considerado uno de los peores contaminantes en la baja troposfera. En altas concentraciones el ozono es tóxico para las plantas y reduce la producción de cultivo (Guderian et al., 1985; Hewit et al., 1990; Zunckel et al., 2006). Sitch et al. (2007) sugieren que los efectos del forzamiento radiativo indirecto del ozono en las plantas podrían contribuir más al calentamiento global que el forzamiento radiativo directo debido a los incrementos del ozono troposférico. El ozono es un irritante respiratorio para los humanos y perjudica los materiales tanto naturales como hechos por el hombre como son la piedra, la construcción y la goma (Serrano et al., 1993). Todos estos efectos perjudiciales son importantes en el sur de Europa (Silibello et al., 1998; Grossi et al., 2000; San José et al., 2005) puesto que la radiación solar del verano agrava los efectos del ozono. Es el

caso de las áreas del norte de España situadas cerca de zonas urbanas e industriales, y especialmente aquellas que se encuentran a sotavento de estas áreas, donde no existen precursores de ozono locales (Soler et al., 2004; Aguirre-Basurko et al., 2006). Por consiguiente, los beneficios medioambientales de controlar, cuantificar, modelizar y pronosticar la dosis y exposición de la población humana, la vegetación y los materiales al ozono es una condición previa esencial para evaluar la escala de los impactos del ozono y desarrollar estrategias de control (Brankov et al., 2003).

En las tres últimas décadas, se han producido importantes progresos en los sistemas de modelización de la calidad del aire. Los modelos simples Gaussiano y de caja han evolucionado hacia modelos estadísticos (Schlink et al., 2006; Abdul-Wahab et al., 2005) y modelos de malla Eulerianos (Hurley et al., 2005; Sokhi et al., 2006). Estos últimos representan el tipo más sofisticado de modelos atmosféricos y la mayoría de las veces se utilizan para problemas que son demasiado complejos de resolver con modelos simples. Debido a los continuos avances, la modelización de malla Euleriana

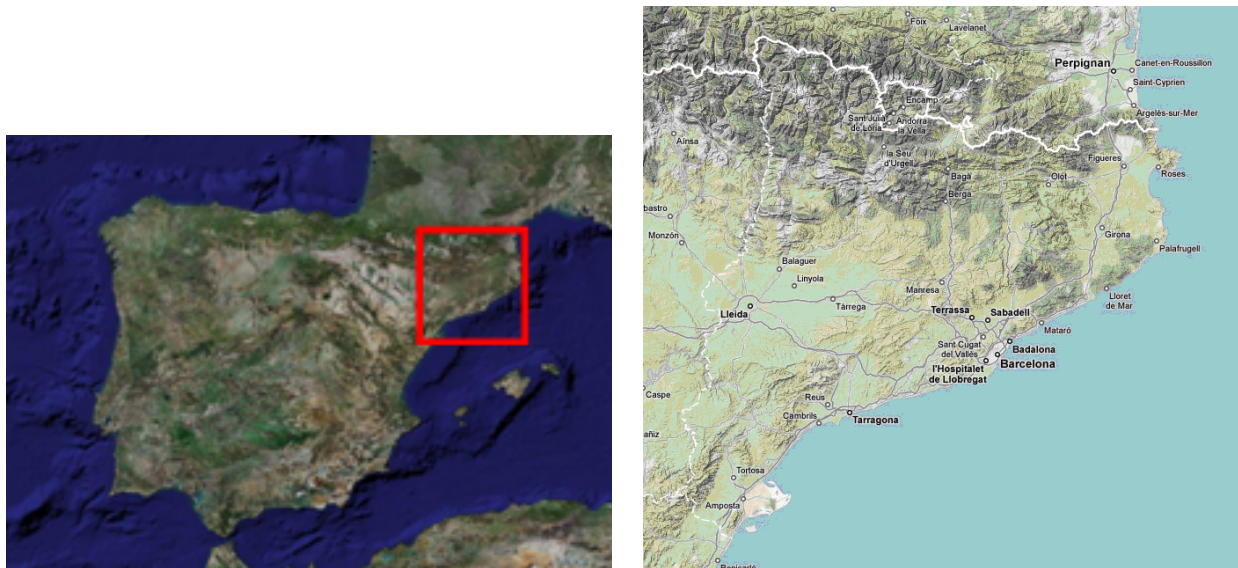


Figura 1. Situación de Cataluña (izquierda) y características geográficas principales (derecha).

se utiliza cada vez más en entornos de investigación para evaluar los impactos en el aire y la salud de futuros escenarios de emisión (Mauzerall et al., 2005). Los modelos Eulerianos de calidad del aire se han convertido en una herramienta útil para dirigir y evaluar la contaminación fotoquímica y representan un complemento que debería reducir la actividad a menudo costosa de monitorización de la calidad del aire.

Sin embargo, la modelización tiene una serie de limitaciones. Los modelos requieren datos iniciales en gran cantidad sobre las emisiones y la meteorología, que no siempre son fiables o fáciles de conseguir. La capacidad de los modelos para representar el mundo real está limitada por muchos factores, incluyendo la resolución espacial y las descripciones de los procesos. Puesto que los modelos siguen siendo inseguros en sus predicciones, se requiere una validación extensiva antes de que se puedan utilizar y resulten fiables (Denby et al., 2008).

En un intento de conseguir estos requisitos, se han realizado varios estudios en algunas zonas (Hogrefe et al., 2001; Zhang et al., 2006a, 2006b). Millan et al. (2000) y Gangoiti et al. (2001) estudiaron la dinámica fotooxidante en la parte noroeste del Mediterráneo. Además, para el noreste de España, varios estudios han evaluado el rendimiento del modelo MM5-EMICAT2000-CMAQ. Esto se realizó utilizando una serie de resoluciones horizontales, comparando distintos mecanismos fotoquímicos o examinando la capacidad del modelo para pronosticar las altas concentraciones de ozono durante las situaciones típicas de verano (Jiménez et al., 2006a; Jimenez et al., 2003; Jiménez et al., 2006b).

En este artículo se presenta la validación de un nuevo sistema de modelización mesoescalar de la calidad del aire. Aunque se aplica en el mismo dominio de integración utilizando los mismos modelos meteorológicos y fotoquímicos, MM5 y CMAQ como en estudios anteriores, la validación

cubre un período más largo (6 meses) y básicamente el sistema utiliza un nuevo modelo de emisión MNEQA. Este consiste en un inventario de emisiones altamente disgregado de gases contaminantes y partículas (Ortega et al., 2009). Las simulaciones que utilizan este nuevo sistema de calidad del aire se evalúan utilizando una red de 48 estaciones de calidad del aire.

En la sección 2 se presenta una descripción del sistema de modelización MM5/MNEQA/CMAQ mientras que la evaluación del modelo estadístico de la calidad del aire respecto a las medidas se presenta en la sección 3. Finalmente, se informa sobre algunas conclusiones en la sección 4.

2 Sistema de modelización

2.1 Área de estudio

El área de estudio es Cataluña, situada en el noreste de la Península Ibérica. Recientemente, su población ha alcanzado los siete millones de habitantes, la mayoría de los cuales viven en Barcelona y su entorno. Cataluña es un área mediterránea con una topografía compleja. Está limitada por los Pirineos al norte y el Mar Mediterráneo al sur y al este. Desde un punto de vista geográfico, el territorio puede dividirse en tres áreas diferenciadas. Un área se extiende más o menos paralelamente a lo largo de la costa e incluye la llanura costera, la sierra litoral y la sierra prelitoral. La segunda área se llama depresión central; y la tercera incluye el Prepirineo y el Pirineo. Las áreas industriales principales y la mayoría de la población se concentran en la costa. En verano, hay episodios de alta concentración de ozono en el interior, a veces en áreas rurales, debido a la advección de los contaminantes por parte de la brisa marina, que los lleva desde la costa al territorio rural del interior.



Figura 2. Dominios del modelo.

2.2 Modelo meteorológico

El modelo mesoescalar PSU/NCAR, MM5 (Grell et al., 1994), versión 3.7, se utiliza para generar campos meteorológicos. Estos han sido la entrada para el sistema de modelización de calidad del aire. Las simulaciones meteorológicas se realizan para dos dominios acoplados en los dos sentidos (Figura 2) con resoluciones de 27 km y 9 km. El dominio más grande cubre el sur de Europa, incluyendo España, la mitad de Francia y el norte de Italia y un dominio interior de 30×30 celdas cubre Cataluña.

Las condiciones iniciales y de contorno para el dominio D1 se actualizan cada seis horas con datos de análisis del modelo global del Centro Europeo de Previsión Meteorológica de Medio Plazo (ECMWF) con una resolución de 0.5° × 0.5°. Los procesos de la capa límite se calculan con el esquema MRF (Troen y Mahrt, 1986); el esquema de Grell (Grell, 1993) se utilizó para la parametrización de los cúmulos, mientras que la microfísica se parametriza utilizando el esquema de Schultz (Schultz, 1995). Para el esquema de la superficie terrestre, se activa el modelo de suelo de cinco capas, en el que la temperatura se pronostica utilizando la ecuación de difusión vertical para las capas de 0.01, 0.02, 0.04, 0.08 y 0.16 m bajo la superficie, con la asunción de sustrato fijo (Dudhia, 1996). La radiación solar se parametriza utilizando el esquema de radiación de las nubes (Dudhia et al., 2004). La resolución vertical incluye 32 niveles, 20 por debajo de 1500 m aproximadamente, con el primer nivel a aproximadamente 15 m y la parte superior del dominio a unos 100 hPa. La distribución de las capas verticales, con una resolución más alta en las capas bajas, es una práctica común (Zhang et al., 2006a, 2006b; Bravo et al., 2008). Los archivos de salidas de cada hora del MM5 se procesan con la versión 3.2 del Procesador de Interficie de Química y Meteorología (MCIP) para el modelo CMAQ.

2.3 Modelo fotoquímico

El modelo de transporte químico utilizado es el modelo de los EEUU EPA3/CMAQ (Byung y Ching, 1999). Este

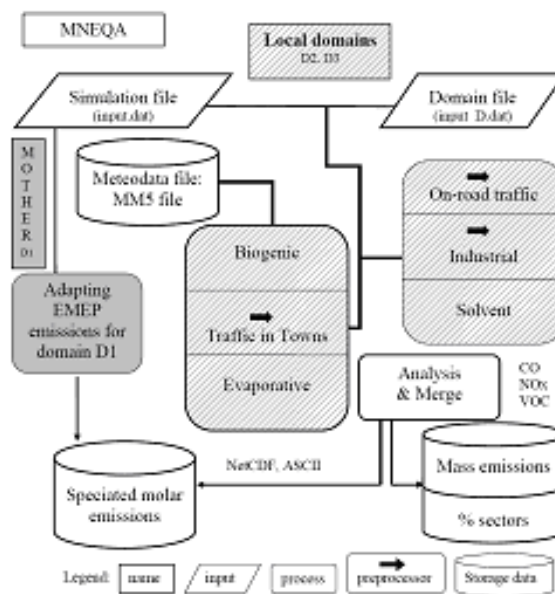


Figura 3. Diagrama de flujo para el modelo MNEQA. El gris es para los módulos del dominio madre, D1. El sombreado identifica los módulos en el dominio local y las flechas negras continuas simbolizan los preprocesadores. A partir de Ortega et al. (2009).

modelo, con el apoyo de la Agencia de Protección Medioambiental (EPA) de los EEUU, está en continua evolución. Las simulaciones v4.6 del CMAQ utilizan el mecanismo químico CB-05 y el solucionador asociado EBI (Yarwood et al., 2005), incluyendo las reacciones de gases que implican N_2O_5 y H_2O , y elimina las combinaciones de mecanismos obsoletos (p.ej. gas+aerosoles w/o). Además de estos cambios, la versión 4.6 incluye distintas modificaciones en el módulo del aerosol (AERO4). Los detalles adicionales relacionados con la última versión del CMAQ pueden encontrarse en la página web del centro del Sistema de Análisis y Modelización de la Comunidad (CMAS) (<http://www.cmascenter.org/help>).

El modelo CMAQ utiliza la misma modelización del modelo que la simulación MM5. Las condiciones de contorno y los valores de inicialización para el dominio D1 vienen de un perfil vertical proporcionado por el mismo CMAQ, mientras que las condiciones iniciales y de contorno para el dominio D2 están proporcionadas por el dominio D1. El modelo se ejecuta con un período de ajuste inicial de 24 h (*spin-up*).

2.4 Modelo de Emisión MNEQA

El MNEQA es un modelo de emisión desarrollado por los autores (Ortega et al., 2009). Puesto que es una parte crítica del sistema de modelización de la calidad del aire, en esta sección presentamos una visión general y un resumen de las diferencias en las metodologías aplicadas a los dominios D1 y D2.

Tabla 1. Estadísticas de rendimiento cuantitativo para el pronóstico de concentración de ozono, utilizando el dominio de malla de 9 km.

Parámetro estadístico	Definición matemática
Error sistemático medio (MB)	$MB = \frac{1}{N} \sum_1^N (C_m - C_0)$
Error medio normalizado del error sistemático (MNBE)	$MNBE = \frac{1}{N} \sum_1^N \left(\frac{C_m - C_0}{C_0} \right) \cdot 100\%$
Error sistemático fraccionado medio (MFB)	$MFB = \frac{1}{N} \sum_1^N \left[\frac{C_m - C_0}{\left(\frac{C_m + C_0}{2} \right)} \right] \cdot 100\%$
Error bruto absoluto medio (MAGE)	$MAGE = \frac{1}{N} \sum_1^N C_m - C_0 $
Error bruto medio normalizado (MNGE)	$MNGE = \frac{1}{N} \sum_1^N \left(\frac{ C_m - C_0 }{C_0} \right) \cdot 100\%$
Error medio normalizado (NME)	$NME = \frac{\sum_1^N C_m - C_0 }{\sum_1^N C_0} \cdot 100\%$
Error sistemático medio normalizado (NMB)	$NMB = \frac{\sum_1^N (C_m - C_0)}{\sum_1^N C_0} \cdot 100\%$
Error cuadrático medio (RMSE)	$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_1^N (C_m - C_0)^2}$
Error normalizado del valor máximo del dominio (UPA)	$UPA = \frac{C_m(max) - C_0(max)}{C_0(max)} \cdot 100\%$

2.4.1 Visión general

Los dominios anidados normalmente se aplican a los sistemas de modelización de la calidad del aire porque los modelos fotoquímicos, de emisión y meteorológicos tienen que tratar con la variabilidad de las mallas y los diferentes dominios. Como consecuencia de la variabilidad en la resolución espacial, la metodología del MNEQA varía de un dominio a otro. Las principales diferencias entre los dominios son la resolución de malla y todas las áreas cubiertas en uno o más países. Aunque se busca el mismo grado de descripción de las emisiones para todos los dominios, la información sobre las fuentes de emisión y las actividades antropogénicas no están lo suficientemente detalladas o disponibles en todas las jurisdicciones. Sin embargo, la Unión Europea ha emprendido algunas acciones a este respecto; ha desarrollado el Registro Europeo de Emisión de Contaminantes (EPER <http://eper.ec.europa.eu>) para los informes de los años 2001 y 2004 y los Registros de Transferencia y Liberación de Contaminantes (PRTR) para el 2007.

Debido a la dificultad a la hora de registrar los datos requeridos por un modelo de emisiones para un dominio muy grande, la metodología aplicada al dominio madre (D1) es descendiente mientras que la utilizada en el dominio interior (D2) es principalmente ascendente. Se desarrolló una estructura modular para tener en cuenta las características de cada fuente de emisión. La Figura 3 muestra el diagrama de flujo del MNEQA y su estructura. El módulo para D1 adapta las

emisiones de EMEP (Vestreng et al., 2006) para las resoluciones espaciales y temporales en D1. Un archivo de simulación proporciona información general sobre el período de simulación en el módulo D1 y también en D2 (rallado en la Figura 3). Los archivos del dominio con la descripción de la malla del dominio simulado se alimentan con los módulos. Algunos módulos (como: Biogénico, Tránsito en las ciudades y Evaporativo) necesitan un archivo de datos meteorológicos porque las emisiones dependen de parámetros meteorológicos, tales como la temperatura y la radiación. Los preprocesadores (flechas negras continuas en la Figura 3) están disponibles para los módulos siguientes: Tránsito en las ciudades, Tránsito industrial y por Carretera. Finalmente, el módulo Análisis y Fusión crea salidas (en los formatos ASCII y NetCDF) a partir de las simulaciones del MNEQA: emisiones molares especiadas, tal como requiere el CMAQ; emisiones de masa para CO, NO_x y VOCs y partículas; y porcentaje de masa de la contribución a las emisiones totales por parte de cada módulo de emisiones.

El MNEQA utiliza la salida de un modelo meteorológico para calcular la temperatura y los datos de radiación. Finalmente, las emisiones de compuestos se clasifican en las especies utilizadas en el mecanismo fotoquímico: el MNEQA hace la especiación para CB-05.

2.4.2 Emisiones en el dominio D1

El MNEQA utiliza una metodología descendente basada en los datos de emisiones del inventario experto de

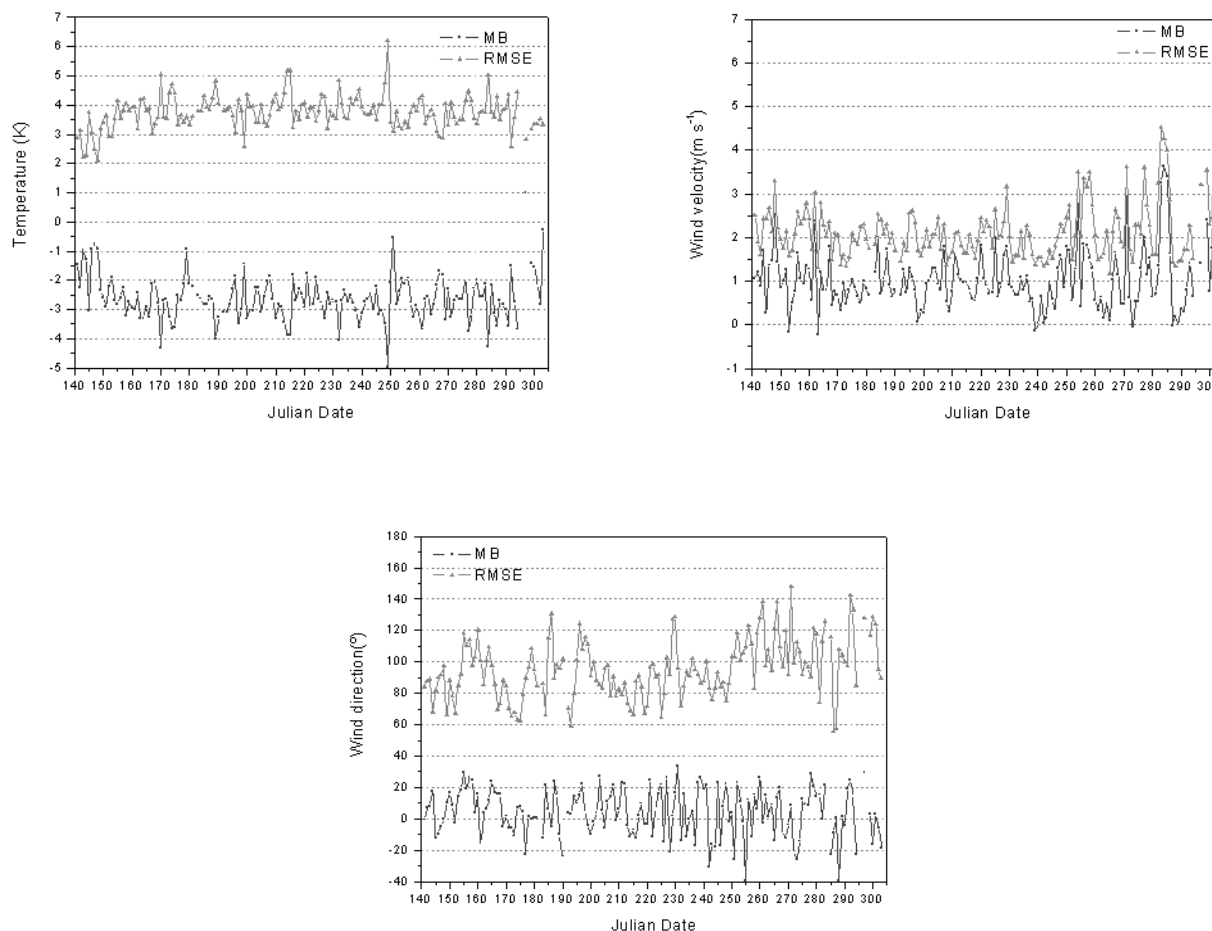


Figura 4. Evolución, para el período estudiado, del MB y RMSE diarios. (a) (arriba izquierda) corresponde a la temperatura del aire a 1.5 m (s.n.s.); (b) (arriba derecha) corresponde a la velocidad del viento medida a 10 m (s.n.s.) y (c) corresponde a la dirección del viento medida a 10 m (s.n.s.).

emisiones del EMEP (Mayo, 2007) (Vestreng et al., 2006). Europa y una pequeña parte del Norte de África están cubiertas por el dominio del EMEP, con una malla de resolución $50 \times 50 \text{ km}^2$. Las emisiones se computan a partir de los datos nacionales de 11 sectores, cinco contaminantes principales (CO , NH_3 , NMVOC , NO_x , SO_x) y dos tipos de partículas ($\text{PM}_{2.5}$ y $\text{PM}_{\text{grande}}$). Los datos de emisiones disponibles cubren un período de varios años. El algoritmo consiste en asignar a la celda de cada dominio madre el valor de las emisiones de la celda de EMEP más cercana, multiplicado por un factor proporcional. Este factor representa el coeficiente entre el número de celdas de D1 y el número de celdas del dominio del EMEP que interseccionan dentro de D1.

La especiación se calcula utilizando perfiles de la página web del Consejo de Recursos del Aire de California (CARB) (<http://arb.ca.gov/ei/speciate/dnldopt.htm#specprof>). Los perfiles mensuales y semanales (Parra, 2004)

se han aplicado para determinar los valores de emisión para cada hora basados en el día de la semana y el mes del año.

2.4.3 Emisiones en el dominio D2

En el caso del dominio local, hemos utilizado una aproximación ascendente para las emisiones biogénicas, del tránsito, de consumo e industriales. Teniendo en cuenta varias características geométricas, hicimos la distinción entre fuentes de superficie, lineales y de punto. Estas características geométricas se reflejan en nuestros cálculos utilizando un Sistema de Información Geográfico (SIG). Finalmente, las emisiones se fusionan para cada celda de malla porque el modelo fotoquímico no distingue entre los varios tipos de fuente; lo único que se necesita es un valor de emisiones para cada celda de malla, cada paso temporal y cada componente.

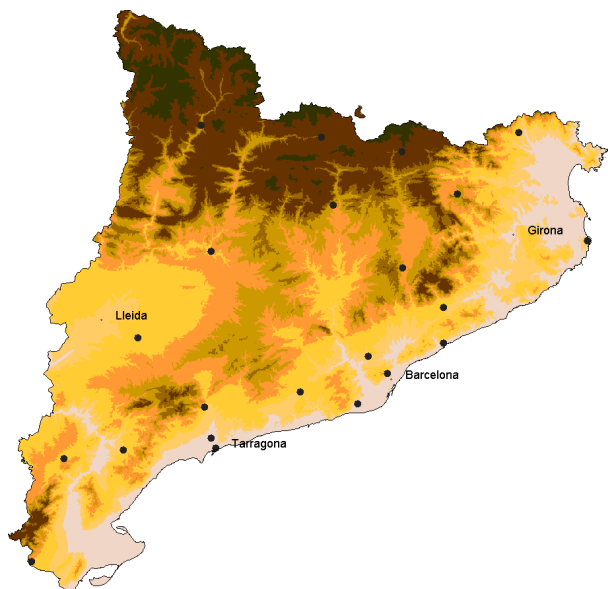


Figura 5. Características topográficas del área estudiada y la situación de las 22 estaciones de calidad del aire (•) utilizadas.

2.4.4 Configuración del modelo de calidad del aire

En esta sección, se describen las características de la modelización utilizada en las simulaciones realizadas con el modelo de calidad del aire. El dominio D1 tiene una resolución de malla horizontal de 27 km y el dominio interior, D2, de 9 km. D1 tiene una extensión de 68×44 celdas de malla centradas en la latitud 41.42°N y la longitud de 1.40°E . D2 tiene su esquina izquierda inferior en D1 (31,19) con 30×30 celdas de malla. El número total de niveles verticales del modelo es de 30 para todos los dominios, hasta 100 hPa. Como el modelo fotoquímico requiere condiciones de contorno, los dominios de datos tienen menos celdas que en el límite horizontal. Por eso, MNEQA y CMAQ se llevan a cabo en D1 con 66×42 celdas de malla y en D2 con 28×28 celdas de malla. En todos los dominios y modelos se utiliza una resolución de paso temporal de una hora.

3 Evaluación estadística del modelo de la calidad del aire respecto a las medidas

Puesto que un modelo de calidad del aire es un conjunto de tres modelos, meteorológico, fotoquímico y de emisión, y como el último ya ha sido comparado con otros modelos de emisión (Ortega et al., 2009), en esta sección se evaluarán los resultados del modelo meteorológico MM5 y el modelo fotoquímico CMAQ.

3.1 Evaluación de los campos meteorológicos

Los resultados de la modelización se han evaluado a partir de un conjunto de distintas estaciones meteorológicas

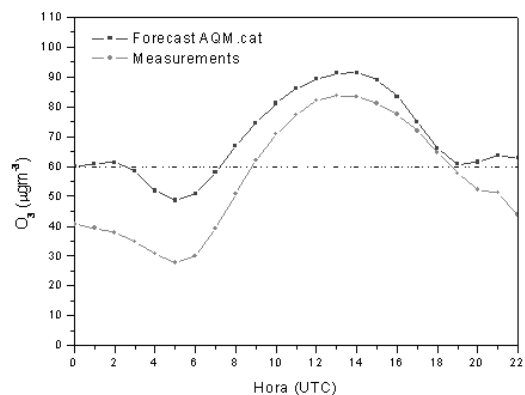


Figura 6. Evolución temporal de las concentraciones de ozono promediadas de cada hora proporcionadas por el modelo de calidad del aire y para las 48 estaciones de calidad del aire para el período estudiado.

distribuidas por Cataluña que pertenecen al *Servei Meteorològic de Catalunya*. La evaluación incluye la velocidad y la dirección del viento medidas a 10 m sobre el nivel del suelo (s.n.s., siglas en castellano) y la temperatura del aire a 1.5 m (s.n.s.). El Error Cuadrático Medio (RMSE) y el Error Sistemático Medio (MB) para estos parámetros meteorológicos se han calculado para datos de cada hora proporcionados por el modelo y las observaciones (ver Tabla 1 para la definición), obteniendo así un valor estadístico diario. Las estadísticas del viento y la dirección del viento se calculan para una velocidad del viento superior a 0.5 m s^{-1} , ya que la dirección del viento no es fiable para velocidades más bajas. El cálculo de parámetros estadísticos es directo para la velocidad del viento y la temperatura, pero la naturaleza circular de la dirección del viento dificulta la obtención de las estadísticas correspondientes. Para evitar este problema, hemos utilizado una dirección de viento modificada, donde 360° fueron añadidos o restados del valor pronosticado para minimizar la diferencia absoluta entre las direcciones del viento observadas y las pronosticadas (Lee y Fernando, 2004). Por ejemplo, si el pronóstico es 10° y la observación correspondiente es 340° , entonces se utiliza un valor pronosticado de 370° .

La Figura 4 muestra la evolución del RMSE y MB de la velocidad del viento, la dirección del viento y la temperatura para el período estudiado. La velocidad del viento (Figura 4a) indica un RMSE delimitado entre 1 y 3 m s^{-1} y un MB entre 0 y 2 m s^{-1} en la mayor parte del período, desde mayo hasta mediados de septiembre; desde este punto hasta el final del período, el RMSE aumenta hasta 4 m s^{-1} y el MB hasta 3.5 m s^{-1} . El primer período se caracteriza principalmente por una situación anticiclónica con pequeños gradientes de presión que favorecen el desarrollo de circulaciones mesoescalares como el régimen de brisa marina en la

Tabla 2. Resumen estadístico correspondiente a las estaciones de calidad del aire seleccionadas asociadas a la simulación de calidad del aire de las concentraciones medias de ozono de cada hora y de un máximo de 1-h y 8-h para el período estudiado.

Estadística	Medias horarias (00 a 24 UTC)	Medias horarias para las concentraciones de ozono $\geq 60 \mu\text{g m}^{-3}$	Concentración máxima de 1-h para las concentraciones de ozono $\geq 60 \mu\text{g m}^{-3}$	Concentración máxima de 8-h para las concentraciones de ozono $\geq 60 \mu\text{g m}^{-3}$
MB ($\mu\text{g m}^{-3}$)	1.35	-1.90	-2.34	-0.83
MAGE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	31.21	16.47	14.72	11.96
MNBE (%)	6.90	-0.41	0.11	1.12
MNGE (%)	41.98	19.95	14.66	13.31
MFB (%)	-2.52	-4.61	-1.67	-0.48
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	29.97	21.75	19.38	16.10
NMB (%)	0.93	-2.21	-2.42	-1.00
NME (%)	21.52	19.18	15.22	14.48
UPA (%)	11.5			

costa y los vientos de montaña en el interior. La velocidad del viento asociada a estos patrones de circulación está bastante bien reproducida por el modelo, aunque tiende a subestimar ligeramente la velocidad del viento durante el día y a sobrestimarla por la noche. El modelo no reproduce con precisión los vientos muy flojos (Bravo et al., 2008), típicos del área estudiada, por la noche. Esto provoca el valor positivo de MB durante todo el período. Durante el segundo período, la situación meteorológica ha sido mucho más variable encabezada por la escala sinóptica y reflejada en altos valores del MB y RMSE.

La Figura 4b muestra la evolución del RMSE y MB para la dirección del viento. El RMSE toma valores entre 60° y 120° para el primer período, mientras que durante el segundo período los límites varían entre 80° y 140° . Los valores del MB van entre 20° y -20° , teniendo la desviación más alta durante el segundo período.

La evolución del RMSE y MB para la temperatura del aire se presenta en la Figura 4c. Para la mayoría del período estudiado, el RMSE toma valores entre 3 y 4 grados, mientras que el MB los toma entre -2 y -4 grados. Estos valores destacan la tendencia a subestimar la temperatura del aire a 1.5 m (s.n.s.).

El rendimiento del modelo meteorológico concuerda con varios estudios anteriores sobre las aplicaciones meteorológicas para la modelización de la calidad del aire (Zhang et al., 2006a), en particular aquellos que se basan en el área de estudio, (Jiménez et al., 2008; Jiménez et al., 2006a) donde se ha dado parte sobre las estadísticas clásicas para los campos de superficie (p. ej. la temperatura, el rango de velocidad del viento de 1 a 4 grados y de 2 a 4 m s^{-1}). Sin embargo, nuestra evaluación estadística muestra una dispersión ligeramente superior, principalmente para la dirección del viento. La razón principal podría ser la resolución horizontal, ya que los estudios meteorológicos sobre los terrenos complejos requieren más resolución horizontal y vertical para resolver los patrones de circulación mesoescalares complejos (Jiménez et al., 2006a).

3.2 Evaluación del modelo fotoquímico

La métrica estadística para el cálculo del rendimiento del modelo fotoquímico se calcula para las concentraciones de ozono de superficie en 48 emplazamientos de medida en el dominio de modelización de $9 \times 9 \text{ km}^2$. Aunque hay una nueva pauta para evaluar el rendimiento del modelo, US EPA (2007), en este estudio hemos utilizado el US EPA (2005), ya que la nueva pauta no incluye la cuantificación del rango en las métricas estadísticas. Las tres métricas de múltiple procedencia utilizadas son el error normalizado del valor máximo del dominio (UPA), el error medio normalizado del error sistemático (MNBE) y el error bruto medio normalizado (MNGE). Igual que con la guía general y los protocolos para la evaluación del rendimiento (Seigneur et al., 2000), se calculan nuevas métricas estadísticas basadas en el concepto de factores para superar las limitaciones de las medidas tradicionales. Estas estadísticas están resumidas en la Tabla 1.

Para la evaluación, las 48 estaciones de superficie de calidad del aire llamadas XVPCA, acrónimo en catalán de Red de Vigilancia y Previsión de la Contaminación Atmosférica pertenecientes al *Departament de Mediambient de la Generalitat de Catalunya* proporcionan las medidas de cada hora de la concentración de ozono desde el 20 de mayo hasta finales de octubre de 2008 (de ahora en adelante “período estudiado”). Esta red de estaciones cubre todo el dominio con una distribución territorial exacta. Sin embargo, dada la resolución de la celda de malla, $9 \times 9 \text{ km}^2$, no todas las estaciones de medidas cumplen con el criterio para ser representativas del área en la que están localizadas. Es decir, si la celda de malla es representativa de una zona rural, la estación de medida no puede estar localizada en la ciudad principal ya que sus medidas serán representativas de un área urbana. Si se utiliza este criterio, la validación se realiza con sólo 22 estaciones representativas (ver Figura 5 y Tabla 3).

Además de las métricas anteriores, la Agencia de Protección Ambiental de los EEUU (US EPA, 2005) desarrolló una guía que indicaba que es inapropiado establecer un cri-

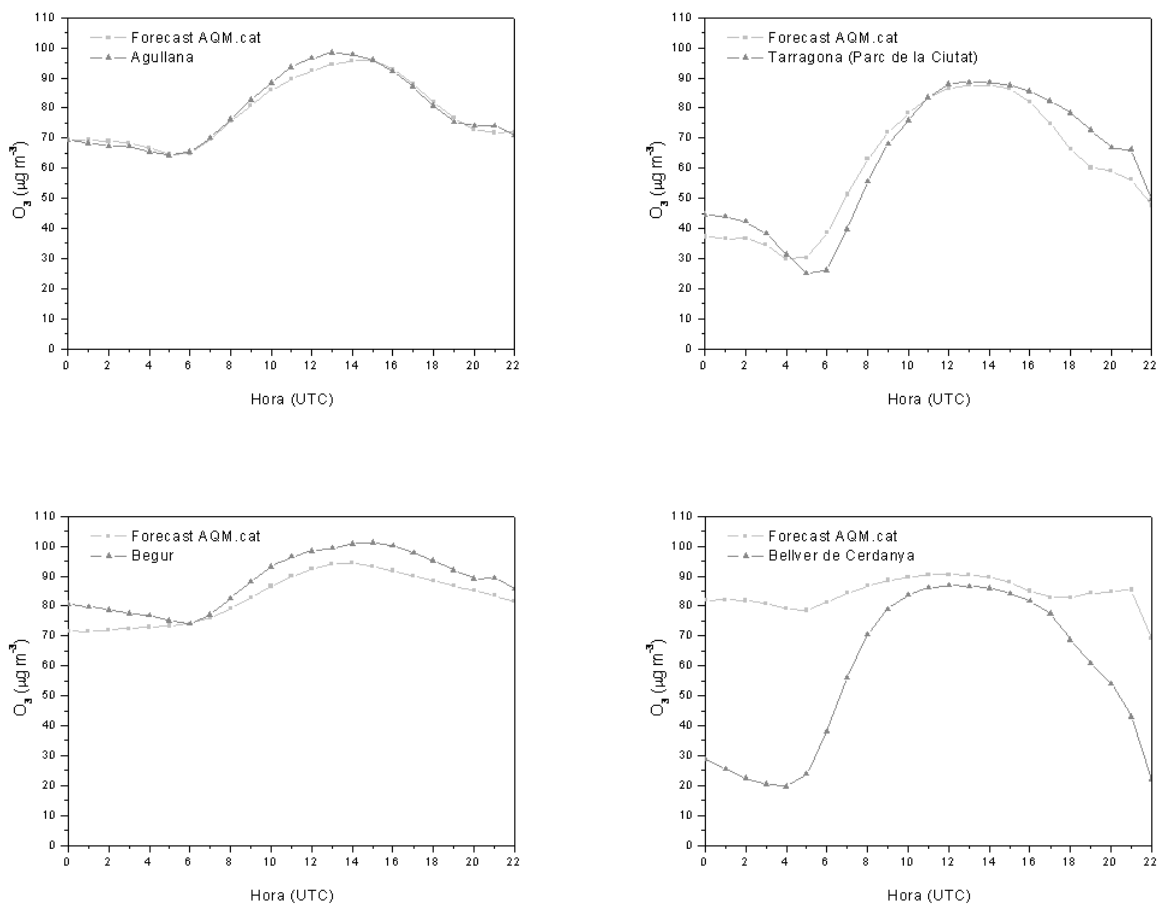


Figura 7. Evolución temporal de las concentraciones de ozono promediadas de cada hora proporcionadas por el modelo de calidad del aire y por algunas estaciones seleccionadas de calidad del aire para el período estudiado.

terio rígido para la aceptación o rechazo del modelo (es decir, ninguna prueba de límites). Aun así, basándose en de modelizaciones anteriores del ozono (US EPA, 1991) se ha establecido un rango de valores común para el error sistemático, el error y la exactitud. Los criterios aceptados son para el MNBE, de ± 5 a $\pm 15\%$; MNGE, de $+30$ a $+35\%$; UPA de ± 15 a $\pm 20\%$. Para todo el período estudiado, los resultados de la Tabla 2 muestran promedios de las métricas estadísticas para las concentraciones de superficie de cada hora, los valores máximos 1-horarios y las concentraciones de ozono máximas diarias 8-horarias.

Para las concentraciones de ozono promediadas de cada hora, los resultados indican que el modelo muestra una ligera tendencia a sobrestimar la concentración de ozono a nivel del suelo (Tabla 2), ya que los valores del MB, MNBE y NMB son positivos, y aunque el MNBE se encuentra dentro del objetivo de rendimiento recomendado por la EPA de $\pm 15\%$, el valor de MNGE es superior al criterio aceptado (35%). Este comportamiento de las concentraciones de ozono promediadas de 24-h se debe probablemente a la contribución

excesiva de las concentraciones de ozono pronosticadas por el modelo durante la noche.

Las tres principales fuentes de error podrían ser: (i) el modelo no representa con suficiente exactitud los procesos fotoquímicos nocturnos (Jiménez et al., 2006b); (ii) el modelo de emisión podría no calcular correctamente las emisiones nocturnas; (iii) los parámetros meteorológicos, como la velocidad del viento, la dirección del viento y la capa de mezcla no están bien reproducidos por el modelo cuando el forzamiento sinóptico es débil y los vientos ambientales son ligeros y variables (Schürmann et al., 2009; Bravo et al., 2008).

Tal como se muestra en la Figura 6, el modelo sobrestima las concentraciones de ozono por la noche. Para resolver este problema, las estadísticas de evaluación del modelo se calculan a menudo utilizando sólo los pares de observación-pronóstico de cada hora para los cuales la concentración observada es superior a un valor específico. Este procedimiento elimina la influencia de las concentraciones bajas, como los valores nocturnos. Con esta finalidad se han

Tabla 3. Estadísticas correspondientes a las estaciones seleccionadas de calidad del aire asociadas a las simulaciones de calidad del aire promediadas a cada hora para las concentraciones de ozono $\geq 60 \mu\text{g m}^{-3}$.

Estación	MB ($\mu\text{g m}^{-3}$)	MNBE (%)	MFB (%)	MAGE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	MNGE (%)	NME (%)	NMB (%)	RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)
Constantí	-2.92	-2.74	-4.47	7.09	8.28	20.12	-8.28	14.12
Pardines	0.95	3.22	1.69	9.84	11.61	14.65	1.41	14.42
Agullana	-5.70	-5.10	-7.19	12.23	13.58	17.26	-8.05	17.63
Juneda	-0.23	0.87	-0.20	6.73	7.98	15.34	-0.52	12.42
Sort	0.98	2.28	1.19	6.05	7.51	14.29	2.31	11.13
S. M. Palautordera	-0.68	-0.14	-1.43	7.04	7.74	16.99	-1.65	14.11
Begur	-7.85	-5.90	-8.53	15.51	16.08	18.69	-9.46	21.51
Santa Pau	0.06	1.20	0.07	6.76	7.69	16.68	0.16	12.94
Gandesa	0.19	1.69	0.32	9.16	11.11	14.41	0.29	13.54
Bellver de C.	1.62	3.09	2.00	6.07	7.59	14.64	3.90	11.27
Ponts	-0.45	0.79	-0.19	6.48	7.23	13.97	-0.97	11.96
La Sénia	1.26	3.09	1.63	9.35	11.70	14.05	1.89	13.30
Tarragona - Ciutat	-5.55	-5.92	-9.02	9.69	11.39	20.34	-11.66	18.06
Rubí	-9.78	-11.31	-17.36	12.45	14.72	33.10	-26.00	23.37
Tona	1.12	2.40	0.89	7.72	9.07	18.18	2.64	14.15
Alcover	3.09	4.62	3.04	6.73	9.16	21.66	9.94	13.24
Guiamets	0.04	1.16	-0.24	8.33	10.16	14.04	0.07	12.97
Berga	1.40	3.06	1.79	7.45	8.89	15.58	2.93	13.00
Vilafranca del P.	-4.95	-5.14	-7.21	8.79	9.99	19.15	-10.80	15.85
Mataró	-5.30	-5.27	-7.79	10.04	11.64	20.60	-10.87	17.67
Gavà	-7.29	-7.60	-10.63	10.11	11.29	22.86	-16.47	18.48
Barcelona - V. H.	-12.52	-14.61	-21.96	15.52	18.34	31.33	-25.26	25.94

utilizado varios valores de corte; sin embargo, $60 \mu\text{g m}^{-3}$ se utiliza con frecuencia y concuerda con la práctica de la EPA (US EPA, 1991; Sistla et al., 1996). Cuando aplicamos esta restricción, el MNGE disminuye hasta el 19.95%, que se encuentra por debajo del objetivo del 35% recomendado por la EPA, aunque el modelo tiende a subestimar las ratios de mezcla del ozono, ya que el MB, NMB, MFB y MNBE son $-1.90 \mu\text{g m}^{-3}$, -2.21% , -4.61% y -0.41% respectivamente. Para una concentración máxima 1-horaria utilizando la misma restricción, el modelo tiende a subestimar (aunque no en todas las 22 estaciones) el valor máximo, ya que el MB es $-2.34 \mu\text{g m}^{-3}$, NMB es -2.42% , MFB es -1.67% y MNBE es 0.11% . Además, el MNGE es 14.66% , por lo tanto, todos los valores se encuentran dentro del marco regulador. Para una concentración máxima 8-horaria, el comportamiento del valor es parecido ya que el MB es $-0.83 \mu\text{g m}^{-3}$, MNBE es 1.12% , NMB es -1.0% , MFB es -0.48% y MNGE es 13.31% . Los pequeños valores positivos para el MNBE, correspondientes a 1-h y 8-h de concentraciones máximas de ozono, indican que en algunas estaciones la ratio entre las concentraciones de ozono simuladas y las observadas es ligeramente superior a la unidad. Por lo tanto, en estos emplazamientos, el sistema de modelización sobrestima las concentraciones de ozono. El valor de la UPA calculado como la diferencia entre el valor observado más alto y el valor pronosticado más alto para todas las horas y estaciones de monitorización para todo el período es de 11.5% , resultado que cumple con el objetivo de $\pm 20\%$ de la EPA. Además, si se calculan los valores

diarios de la UPA, los resultados indican que casi todos los valores de esta estadística (81%) cumplen con los criterios de la EPA para un rendimiento del modelo aceptable. Como resumen de la Tabla 2, concluimos que el modelo muestra una ligera tendencia a subestimar las concentraciones de ozono, ya que cuando aplicamos un umbral de referencia para evitar los valores nocturnos, algunas estadísticas se volvían negativas. La información proporcionada en la Tabla 2, se extiende a cada estación de monitorización utilizada en este estudio (Tabla 3). Además, en la Figura 7 se presentan algunos ejemplos de la evolución temporal de las concentraciones de ozono promediadas de cada hora proporcionadas por el modelo de calidad del aire y las estaciones seleccionadas de calidad del aire. Esta información adicional confirma los resultados y la conclusión derivados de la Tabla 2. El rendimiento del modelo fotoquímico concuerda con varios resultados anteriores sobre la modelización de la calidad del aire en el área estudiada, (Jiménez et al., 2008; Jiménez et al., 2006a), donde los valores estadísticos también cumplen con los criterios de la EPA.

Al igual que la validación sistemática, el error cuadrático medio no sistemático y sistemático, $RMSE_u$ (1) y $RMSE_s$ (2), se calculan para evaluar el error intrínseco en el modelo y el error aleatorio (Appel et al., 2007).

$$RMSE_u = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C - C_m)^2} \quad (1)$$

Tabla 4. Errores sistemáticos y aleatorios para el pico de concentración de ozono para un promedio de 1-h.

Mes	RMSE _s (μg m ⁻³)	$\left(\frac{RMSE_s}{RMSE}\right)^2 \cdot 100$ (%)	RMSE _u (μg m ⁻³)	RMSE (μg m ⁻³)
Junio	11.32	(28.32)	18.01	21.27
Julio	14.35	(45.30)	15.77	21.32
Agosto	9.15	(24.67)	15.99	18.42
Septiembre	15.40	(54.86)	13.97	20.79

Tabla 5. Errores sistemáticos y aleatorios para el pico de concentración de ozono para un promedio de 8-h.

Mes	RMSE _s (μg m ⁻³)	$\left(\frac{RMSE_s}{RMSE}\right)^2 \cdot 100$ (%)	RMSE _u (μg m ⁻³)	RMSE (μg m ⁻³)
Junio	16.54	(61.09)	13.20	21.16
Julio	11.99	(45.70)	13.07	17.74
Agosto	10.48	(39.35)	13.01	16.71
Septiembre	12.64	(43.83)	14.31	19.09

$$RMSE_s = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C - C_0)^2} \tag{2}$$

$$C = a + bC_0 \tag{3}$$

$$RMSE_s = \sqrt{(RMSE_u)^2 + (RMSE_s)^2} \tag{4}$$

Los valores de C_m y C_0 son concentraciones simuladas y observadas, respectivamente; a y b son los coeficientes de regresión por mínimos cuadrados derivados de la regresión lineal entre C_m y C_0 ; y N es el número total de pares de modelo/observación.

Estas nuevas mediciones ayudan a identificar las fuentes o tipos de error, que pueden ayudar considerablemente a perfeccionar el modelo. El RMSE_s representa la porción del error atribuible a los errores sistemáticos del modelo; y el RMSE_u representa los errores aleatorios en el modelo o las entradas del modelo que son más difíciles de interpretar. Para un buen modelo, la porción no sistemática del RMSE tiene que ser más grande que la porción sistemática, mientras que un valor del RMSE_s sistemático alto indica un mal modelo.

Los resultados se dan en las Tablas 4 y 5 para cada mes analizado (junio-septiembre 2008). No se incluyen mayo y octubre, ya que la evaluación empezó el 19 de mayo y doce días no son representativos, mientras que durante octubre hubo falta de datos medidos.

Para el caso estudiado, los resultados para los máximos de concentraciones de ozono de 1-h y 8-h muestran que los valores del error sistemático son inferiores a los no sistemáticos. Sin embargo, los errores son similares, lo que implica que hay que seguir mejorando y perfeccionando el sistema de calidad del aire. Para analizar mejor estos resultados, deberíamos plantearnos realizar un análisis detallado ampliado que identificara los factores clave que influyen en estos errores sistemáticos de pronóstico, tales como la sensibilidad a las condiciones sinópticas, al esquema de la capa límite utilizado en el modelo meteorológico MM5, a las condiciones

Tabla 6. Valores del RDE calculados para las 22 estaciones representativas consideradas durante todo el período estudiado.

Estación	RDE para el límite del valor objetivo (%)
Constantí	27.83
Pardines	7.42
Agullana	4.92
Juneda	17.75
Sort	14.50
Sta. Maria de Palautordera	23.08
Begur	14.83
Santa Pau	19.83
Gandesa	13.25
Bellver de Cerdanya	12.17
Ponts	12.50
La Sénia	15.42
Tarragona - Parc de la Ciutat	25.08
Rubí	42.58
Tona	2.67
Alcover	34.42
Guiamets	21.33
Berga	5.83
Vilafranca del Penedès	33.17
Mataró	10.75
Gavà	25.08
Barcelona - Vall d'Hebron	32.67

de contorno prescritas y al mecanismo químico utilizado en el modelo CMAQ.

3.3 Configurando objetivos de calidad para la “Incertidumbre” de ozono definida por la directiva EC/2008/50

En 2008, el parlamento europeo (EC 2008) ratificó una nueva directiva europea de la calidad del aire. Esta directiva substituía las anteriores con la intención de simplificar y

racionalizar la información, así como introducir nuevos valores límite respecto a PM_{2.5}. Mientras que las directrices anteriores habían basado el cálculo y la información en los datos de medidas, esta nueva directiva pone más énfasis en el uso de modelos para calcular la calidad del aire dentro de las zonas y las aglomeraciones. La mayor atención prestada a la modelización otorga a los Estados Miembros más flexibilidad a la hora de evaluar la información y el potencial para reducir el coste de la monitorización de la calidad del aire. Sin embargo, la modelización, como el control, requiere la implementación e interpretación de los expertos. Los modelos también tienen que ser comprobados y validados antes de poder ser utilizados con confianza para calcular y gestionar la calidad del aire (Denby et al., 2008).

Los objetivos de calidad para un modelo se dan como una incertidumbre en porcentaje. La incertidumbre se describe en la directiva de la siguiente manera: “La incertidumbre para la modelización se define como la desviación máxima de los niveles de concentración medidos y calculados para el 90% de los puntos de monitorización individuales, en el período estudiado, por el valor límite (o valor objetivo en el caso del ozono), sin tener en cuenta el momento temporal de los acontecimientos. La incertidumbre para la modelización se interpretará como aplicable a la región del valor límite apropiado (o valor objetivo en el caso del ozono). Las medidas fijadas que tienen que ser seleccionadas para la comparación con los resultados de la modelización serán representativas de la escala cubierta por el modelo.”

3.3.1 Formulación matemática de los objetivos de calidad de la Directiva

Como las directrices anteriores, la formulación de este texto sigue siendo ambigua. Puesto que hay que calcular los valores, una fórmula matemática debería esclarecer mucho el significado. Por eso, el término “incertidumbre del modelo” sigue estando abierto a interpretación. A pesar de ello, Denby et al. (2008) sugieren que se le debería llamar Error Relativo de la Directiva (RDE) y habría que definirlo matemáticamente en una sola estación del modo siguiente:

$$RDE = \frac{|O_{LV} - M_{LV}|}{LV} \quad (5)$$

donde O_{LV} es la concentración observada más cercana a la concentración del valor límite o el valor objetivo para el ozono y M_{LV} la concentración modelizada correspondiente. El máximo de este valor encontrado en el 90% de las estaciones disponibles es por lo tanto el Error Directivo Relativo Máximo (MRDE).

Para el ozono, los valores medios del RDE calculados como porcentaje para las 22 estaciones representativas se presentan en la Tabla 6. Los resultados muestran una amplia extensión, que va desde valores bajos (2.67%) en las ciudades pequeñas hasta valores altos en las ciudades y zonas industrializadas en las que resulta difícil tener en cuenta todas las emisiones.

Tabla 7. Valores del MRDE para cada período mensual así como para todo el período.

Mes	MRDE para el límite del valor objetivo (%)
Junio	34.42
Julio	31.33
Agosto	27.83
Septiembre	33.50
Todo el período	33.17

Los valores del MRDE, calculados como porcentajes para cada mes así como para todo el período considerado, se presentan en la Tabla 7. Como en la sección anterior, mayo y octubre no se incluyen, ya que la evaluación empezó el 19 de mayo, y 12 días no se consideran representativos. Durante el mes de octubre, hubo falta de datos observados.

Los valores del MRDE presentados en la Tabla 6 muestran porcentajes dentro del marco regulador recomendado en la Directiva Europea EC/2008/50, que es del 50%.

4 Conclusiones

Este estudio describe la evaluación de un sistema de modelización regional acoplado utilizado para simular la calidad del aire respecto del ozono sobre el área del noroeste mediterráneo (Cataluña) durante finales de primavera, verano y principios de otoño del 2008. El sistema de modelización consiste en el modelo mesoescalar MM5, el modelo de emisión MNEQA y el modelo fotoquímico CMAQ. Aunque durante los últimos años en Cataluña se han aplicado los mismos modelos meteorológicos y fotoquímicos, éstos se han evaluado durante períodos cortos y utilizando un modelo de emisión distinto. Este estudio ha demostrado la capacidad del sistema de modelización de calidad del aire MM5/MNEQA/CMAQ para pronosticar las concentraciones de ozono con una precisión suficiente, ya que las estadísticas encajan dentro de los objetivos europeos y de la EPA de rendimiento recomendado. Los resultados diurnos para los pronósticos promediados, de 1-h y 8-h, indican un comportamiento satisfactorio del modelo. No obstante, las concentraciones de ozono simuladas por la noche no pueden medirse y algunas estadísticas quedan fuera del marco regulador. Este comportamiento del modelo podría atribuirse a varios factores, como el cálculo defectuoso de emisiones por la noche, la no suficientemente buena representación de los procesos fotoquímicos nocturnos, y finalmente, la incapacidad del modelo para reproducir algunos parámetros meteorológicos, como la velocidad y la dirección del viento por la noche. Los resultados de los errores sistemáticos y no sistemáticos muestran valores similares, aunque los errores no sistemáticos tienden a ser ligeramente mayores. Además, aunque las estadísticas del modelo se encuentran dentro de los objetivos, algunas, cuando se calculan localmente, no cumplen con los objetivos reguladores. Esta eva-

luación también demuestra una serie de problemas que tienen que ser resueltos en futuras validaciones. Hay que mejorar la resolución del dominio sobre Cataluña, ya que los estudios de dispersión de la contaminación del aire en terrenos complejos necesitan una modelización de alta resolución de la calidad del aire para resolver los patrones complejos de circulación como las brisas del mar, los flujos de drenaje o los flujos de canalización, que no siempre son vistos por el modelo meteorológico que utiliza una amplia resolución horizontal. Además, aumentando la resolución, podría incluirse un mayor número de estaciones en la validación. Actualmente, se está introduciendo una nueva resolución de 3 km.

Agradecimientos. Esta investigación recibió el apoyo de la *Generalitat de Catalunya* con los contratos FBG-304.471 y FBG-304.980. Los autores quieren dar las gracias a los técnicos de este departamento por proporcionarles información sobre el inventario de emisiones y las medidas de calidad del aire. También quieren dar las gracias al *Servei Meteorològic de Catalunya* por proporcionarles los campos meteorológicos iniciales y de contorno para ejecutar el MM5.

Referencias

- Abdul-Wahab, S. A., Bakheit, C. S., y Al-Alawi, S. M., 2005: *Principal component and multiple regression analysis in modelling of ground-level ozone and factors affecting its concentration*, Environ Modell Softw, **20**, 1263–1271.
- Aguirre-Basurko, E., Ibarra-Berastegui, I., y Madariaga, I., 2006: *Regression and multilayer perceptron-based models to forecast hourly O₃ and NO₂ levels in the Bilbao area*, Environ Modell Softw, **21**, 430–446.
- Appel, K. W., Gilliland, A. B., Sarwar, G., y Gilliam, R. C., 2007: *Evaluation of the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model version 4.5: Sensitivities impacting model performance. Part I-Ozone*, Atmos Environ, **41**, 9603–9615.
- Brankov, E., Henry, R. F., Civerolo, K. L., Hao, W., Rao, S. T., Misra, P. K., Bloxam, R., y Reid, N., 2003: *Assessing the effects of transboundary ozone pollution between Ontario, Canada and New York, USA*, Environ Pollut, **123**, 403–411.
- Bravo, M., Mira, T., Soler, M. R., y Cuxart, J., 2008: *Intercomparison and evaluation of MM5 and Meso-NH mesoscale models in the stable boundary layer*, Bound-Layer Meteor, **128**, 77–101.
- Byung, D. W. y Ching, J. K. S., 1999: *Science algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modelling System*, U.S. EPA/600/R-99/030.
- Denby, B., Larssen, S., Guerreiro, C., Douros, J., Moussiopoulos, N., Fragkou, L., Gauss, M., Olesen, H., y Miranda, A. I., 2008: *Guidance on the use of models for the European air quality directive*, ETC/ACC Report.
- Dudhia, J., 1996: *A multi-layer soil temperature model for MM5*. Preprints, Sixth PSU/NCAR Mesoscale Model Users' Workshop, NCAR, Boulder, CO, 49-50.
- Dudhia, J., Gill, D., Manning, K., Wang, W., y Bruyere, C., 2004: *PSU/NCAR mesoscale modeling system tutorial class notes and user's guide: MM5 modeling system version 3*, NCAR, <http://www.mmm.ucar.edu/mm5/documents/tutorial-v3-notes.html>.
- EMEP, 2007: *EMEP/MMSC-W Technical Report 1/2006* ISSN 1504-6179, <http://www.emep.int>.
- Gangoiti, G., Millan, M., Salvador, R., y Mantilla, E., 2001: *Long-range transport and re-circulation of pollutants in the western Mediterranean during the project Regional Cycles of Air Pollution in the West-central Mediterranean Area*, Atmos Environ, **35**, 6267–6276.
- Grell, G., 1993: *Prognostic evaluation of assumptions used by cumulus parameterizations*, Mon Weather Rev, **121**, 764–787.
- Grell, G., Dodhia, J., y Stauffer, D., 1994: *A Description of the Fifth Generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5)*, NCAR. Tech. Note TN-398+STR, NCAR, Boulder, CO, 117 pp.
- Grossi, P., Thunis, P., Martilli, A., y Clappier, A., 2000: *Effect of sea breeze on air pollution in the greater Athens area: Part II: Analysis of different Emissions Scenarios*, J Appl Meteorol, **39**, 563–575.
- Guderian, R., Tingey, D. T., y Rabe, R., 1985: *Effects of photochemical oxidants on plants*. Air Pollution by Photochemical Oxidants, Guderian R., Springer, Berlin, pp. 129-333.
- Hewitt, C., Lucas, P., Wellburn, A., y Fall, R., 1990: *Chemistry of ozone damage to plants*, Chem Ind, **15**, 478–481.
- Hogrefe, C., Rao, S. T., Kasibhatla, P., Kallos, G., Tremback, C. T., Hao, W., Sistla, G., Mathur, R., y McHenry, J., 2001: *Evaluating the performance of regional-scale photochemical modelling systems: Part II- ozone predictions*, Atmos Environ, **35**, 4175–4188.
- Hurley, P. J., Physick, W. L., y Luhar, A. K., 2005: *TAPM: a practical approach to prognostic meteorological and air pollution modelling*, Environ Modell Softw, **20**, 737–752.
- Jimenez, J., Baldasano, J. M., y Dabdub, D., 2003: *Comparison of photochemical mechanisms for air quality modeling*, Atmos Environ, **37**, 4179–4194.
- Jiménez, P., Jorba, O., Parra, R., y Baldasano, J. M., 2006a: *Evaluation of MM5-EMICAT2000-CMAQ performance and sensitivity in complex terrain: High-resolution application to the North-eastern Iberian Peninsula*, Atmos Environ, **40**, 5056–5072.
- Jiménez, P., Lelieveld, J., y Baldasano, J. M., 2006b: *Multiscale Modelling of air pollutants Dynamics in the North-Western Mediterranean Basin during a typical summertime episode*, J Geophys Res, **111**, D18 306.
- Jiménez, P., Jorba, O., Baldasano, J. M., y Gassó, S., 2008: *The Use of a Modelling System as a Tool for Air Quality Management: Annual High-Resolution Simulations and Evaluation*, Sci Total Environ, **390**, 323–340.
- Lee, S. y Fernando, H. J. S., 2004: *Evaluation of Meteorological Models MM5 and HOTMAC Using PAFEX-I Data*, J Appl Meteorol, **43**, 1133–1148.
- Mauzerall, D. L., Sultan, B., Kim, J., y Bradford, D., 2005: *NO_x emissions: variability in ozone production, resulting health damages and economic costs*, Atmos Environ, **39**, 2851–2866.
- Millan, M., Mantilla, E., Salvador, R., Carratala, A., Sainz, J. M., Alonso, L., Gangoiti, G., y Navazo, M., 2000: *Ozone cycles in the western Mediterranean basin: Interpretation of monitoring data in complex coastal terrain*, J Appl Meteorol, **39**, 487–508.
- Ortega, S., Soler, M. R., Alarcón, M., y Arasa, R., 2009: *MNEQA: An emissions model for photochemical simulations*, Atmos Environ, **43**, 3670–3681.
- Parra, R., 2004: *Desarrollo del modelo EMICAT2000 para la estimación de emisiones de contaminantes del aire en Cataluña y su uso en modelos de dispersión fotoquímica*, PhD Dissertation, Universitat Politècnica de Catalunya, Spain, PhD Dissertation, <http://www.tdx.cat/TDX-0803104-102139>.
- San José, R., Stohl, A., Karatzas, K., Bohler, T., James, P., y Pérez, J. L., 2005: *A modelling study of an extraordinary night time*

- ozone episode over Madrid domain, *Environ Modell Softw*, **20**, 587–593.
- Schlink, U., Herbarth, O., Richter, M., Dorling, S., Nunnari, G., Gawley, G., y Pelikan, E., 2006: *Statistical models to assess the health effects and to forecast ground level ozone*, *Environ Modell Softw*, **21**, 547–558.
- Schultz, P., 1995: *An explicit cloud physics parameterization for operational numerical weather prediction*, *Mon Weather Rev*, **123**, 3331–3343.
- Schürmann, G. J., Algieri, A., Hedgecock, I. M., Manna, G., Pirrone, N., y Sprovieri, F., 2009: *Modelling local and synoptic scale influences on ozone concentrations in a topographically complex region of Southern Italy*, *Atmos Environ*, **43**, 4424–4434.
- Seigneur, C., Pun, B., Pai, P., Louis, J. F., Solomon, P., Emery, C., Morris, R., Zahniser, M., Worsnop, D., Koutrakis, P., White, W., y Tombach, I., 2000: *Guidance for the performance evaluation of three-dimensional air quality modeling systems for particulate matter and visibility*, *J Air Waste Manage Assoc*, **50**, 588–599.
- Serrano, E., Macias, A., y Castro, M., 1993: *An improved direct method of rubber craking analysis for estimating 24-hour ozone levels*, *Atmos Environ*, **27**, 431–442.
- Silibello, C., Calori, G., Brusasca, G., Catenacci, G., y Finzi, G., 1998: *Application of a photochemical grid model to Milan metropolitan area*, *Atmos Environ*, **32**, 2025–2038.
- Sistla, G., Zhou, N., Hao, W., Ku, J. Y., y Rao, S. T., 1996: *Effects of uncertainties in meteorological inputs of Urban Airshed Model predictions and ozone control strategies*, *Atmos Environ*, **30**, 2011–2025.
- Sitch, S., Cox, P. M., Collins, W. J., y Huntingford, C., 2007: *Indirect Radiative Forcing of Climate Change through Ozone Effects on the Land-Carbon Sink*, *Nature*, **448**, 791–794.
- Sokhi, R. S., San José, R., Kitwiroon, N., Fragkou, E., Pérez, J. L., y Middleton, D. R., 2006: *Prediction of ozone levels in London using the MM5-CMAQ modelling system*, *Environ Modell Softw*, **21**, 566–576.
- Soler, M. R., Hinojosa, J., Bravo, M., Pino, D., y Vilà Guerau de Arellano, J., 2004: *Analyzing the basic features of different complex terrain flows by means of a Doppler Sodar and a numerical model: Some implications to air pollution problems*, *Meteorol Atmos Phys*, **85**, 141–154.
- Troen, I. S. y Mahrt, L., 1986: *A simple model of the atmospheric boundary layer; sensitivity to surface evaporation*, *Bound-Layer Meteor*, **37**, 129–148.
- US EPA, 1991: *Guideline for Regulatory Application of the Urban Airshed Model*, Office of Air and Radiation, Office of Air Quality Planning and Standards, Technical Support Division, Research Triangle Park, North Carolina, US, US EPA Report No. EPA-450/4-91-013.
- US EPA, 2005: *Guidance on the use of models and other analyses in attainment demonstrations for the 8-hour ozone NAAQS*, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina, US, US EPA Report No. EPA-454/R-05-002. October 2005, 128 pp.
- US EPA, 2007: *Guidance of the use of models and other analysis for demonstrating attainment of air quality goals for ozone, PM2.5 and Regional haze*, US Environmental protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina, US, EPA-454/B-07-002.
- Vestreng, V., Rigler, E., Adams, M., Kindbom, K., Pacyna, J. M., Denier van der Gon, H., Reis, S., y Travníkov, O., 2006: *Inventory review. Emission data reported to LRTAP and NEC Directive; Stage 1, 2, and 3 review; Evaluation of inventories of HMs and POPs*.
- Yarwood, G., Roa, S., Yocke, M., y Whitten, G., 2005: *Updates to the carbon bond chemical mechanism: CB05*, Final report to the US EPA, RT-0400675, <http://www.camx.com>.
- Zhang, Y., Liu, P., Pun, B., y Seigneur, C., 2006a: *A Comprehensive Performance Evaluation of MM5-CMAQ for the Summer 1999 Southern Oxidants Study Episode, Part-I. Evaluation Protocols, Databases and Meteorological Predictions*, *Atmos Environ*, **40**, 4825–4838.
- Zhang, Y., Liu, P., Queen, A., Misenis, C., Pun, B., Seigneur, C., y Wu, S. Y., 2006b: *A Comprehensive Performance Evaluation of MM5-CMAQ for the Summer 1999 Southern Oxidants Study Episode, Part-II. Gas and Aerosol Predictions*, *Atmos Environ*, **40**, 4839–4855.
- Zunckel, M., Koosaile, A., Yarwood, G., Maure, G., Venjonoka, K., van Tienhoven, A. M., y Otter, L., 2006: *Modelled surface ozone over southern Africa during the Cross Border Air Pollution Impact Assessment Project*, *Environ Modell Softw*, **21**, 911–924.