

INVESTIGACIÓN EN MARCHA

TESIS DOCTORAL
CURSO 2021-22

DOCTORADO EN
MEDIO AMBIENTE Y SOSTENIBILIDAD

UNIVERSIDAD MIGUEL HERNÁNDEZ DE ELCHE



PROGRAMA DE DOCTORADO EN
MEDIO AMBIENTE Y SOSTENIBILIDAD



Evaluación de instrumentación, desde “low-cost” hasta avanzada, para el estudio de procesos orientados a la comprensión de los problemas de Calidad del Aire y Contaminación Atmosférica en ambientes interiores y exteriores



Doctorando: Mila Ródenas García

Directores: Eduardo Yubero y Amalia Muñoz

Tutora: Nuria Galindo

Departamento/Centro/Instituto:

Dpto. de Física Aplicada. U. Miguel Hernández
Dpto. Química Atmosférica, Fundación CEAM



Objetivo del trabajo

Evaluación de técnicas experimentales para la determinación de contaminantes con impacto en la Contaminación Atmosférica y en la Calidad del Aire, tanto en ambientes interiores como exteriores.

Se plantean dos subtemas a desarrollar →

Medidas de compuestos orgánicos volátiles oxigenados (COV-Os)

Evaluar la calidad de los datos de distintos instrumentos y técnicas para la medida de COV-Os.

Determinar y cuantificar interferencias con otros gases y en distintas condiciones ambientales (HR, T).

Discutir la idoneidad e implicaciones del uso de los distintas técnicas en la determinación de COV-Os, en modelos químicos y en la evaluación de la calidad del aire.

Discutir las características de las técnicas en base a su tecnología y al propósito para el que son usadas.

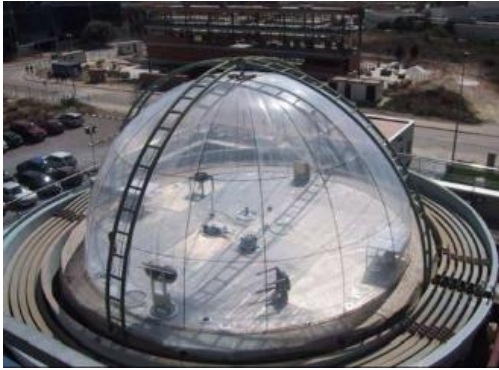
Sensores de bajo coste (LCS) para medidas de calidad del aire

Evaluar el comportamiento de distintos tipos de LCS.

Determinar las interferencias y no linealidades de los sensores ante distintas condiciones ambientales y en presencia de posibles compuestos interferentes.

Recomendaciones de uso

Metodología: Recursos



Cámaras de simulación atmosférica EUPHORE del departamento de Química Atmosférica de la Fundación CEAM

Campaña de medida de COVOs en EUPHORE con instrumentación *on-line* y *off-line*, standard (monitores, FTIR, GC-MS, LC-MS, dosímetros) y avanzada (PTR-MS) y otros instrumentos de centros externos (PTR-ToF-MS, SIFT-MS, KORE_PTR-MS)



Sensores de bajo coste, e.g. CO, CO₂, NO, NO₂, O₃, PM.

Campaña con sensores de CO₂ en EUPHORE.

Contexto: La concentración de CO₂ se usa como indicador de la tasa de ventilación y el riesgo de infección por COVID-19



Bibliografía relacionada con la temática



Matlab: análisis estadístico de datos incluyendo métodos clásicos y avanzados (e.g. análisis de clusters)

Mediciones de COV-Os

✓ Campaña internacional de intercomparación de instrumentos en EUPHORE realizada:
Simulación condiciones urbanas y semiurbanas:

1. Mezcla sintética de carbonilos
2. Productos de fotooxidaciones de COVs biogénicos y antropogénicos
3. Productos de ozonólisis de COVs biogénicos

13 COV-Os testeados, 7 instrumentos on-line y distintos tipos de cartuchos para análisis off-line

Estudio de interferencias a distintas humedades relativas y en presencia de NOx y carbonilos de cadena corta

- ✓ Análisis de datos de instrumentación EUPHORE
- ✓ Integración en datos globales incluyendo instrumentación externa
- ✓ Comienzo redacción de artículo

Tabla instrumentos

Instrumentation/ Analysis Technique	Institute Name	ID
PTR-ToF-MS	University of Eastern Finland	UEF
KORE-PTR-MS	University of Leeds	Leeds
SIFT-MS	University of York	York
PTR-ToF-MS	Forschungszentrum Jülich	FZJ
FTIR		
PTR-MS		
on-line SPME-GC-MS with derivatization C18 cartridges analyzed by GC-MS DNPH cartridges analyzed by LC-MS	CEAM Foundation	CEAM
TENAX cartridges analyzed by GC-MS DNPH cartridges analyzed by LC-MS	Leibniz Institute for Tropospheric Research	TROPOS
TENAX cartridges analyzed by GC-MS	CNR-LISA	CNR-LISA

Sensores

- ✓ Campaña de intercomparación de LCS de CO₂ comerciales en EUPHORE realizada.

Condiciones: 400-3500 ppm CO₂ y 0-80% HR

38 LCS de CO₂ testeados frente a referencia

Experimentos diseñados para el estudio de:

Linealidad y repetibilidad entre sensores

Dependencia de la HR

Posibles interferencias de otros gases

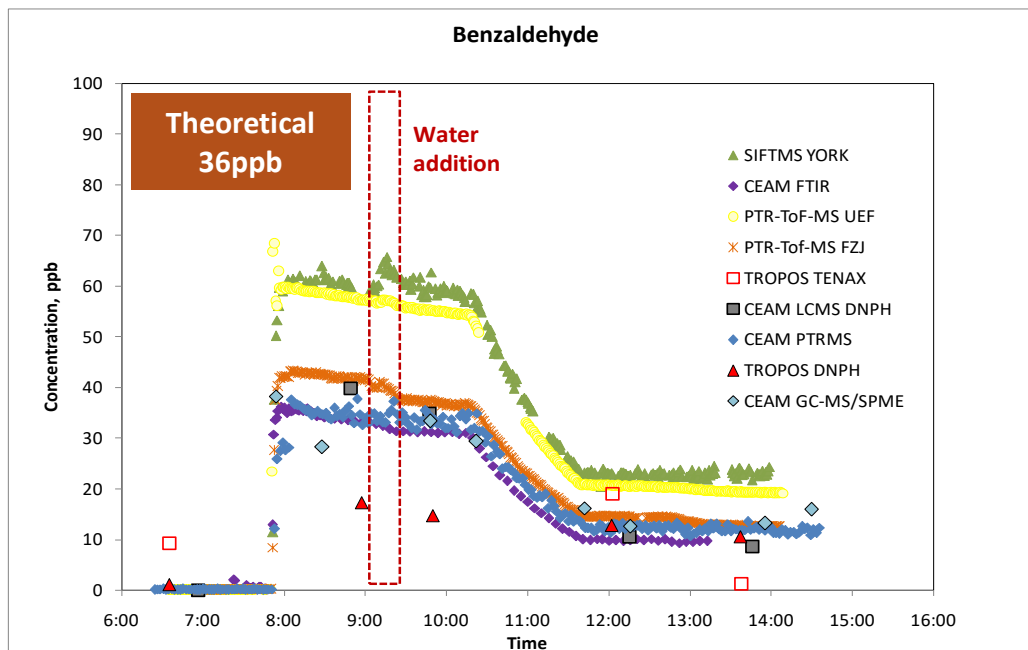
- ✓ Análisis de datos finalizado
- ✓ Parte del tratamiento estadístico realizado
- ✓ Comienzo redacción de artículo

Tabla de sensores

Company /Particular	N. Sensors (Identifier)	Website	Brand (Sensor models)	Other parameters	Background calibration
Neuer Weg	2 (NEU_INDOOR, NEU_OUTDOOR)	https://www.neuerweg-group.com/	NW Virus Risk Alert NW Outdoor AQ monitor	PM, T, HR	Yes
Sequopro	2 (SEQ_215, SEQ_217)	www.sequopro.es	?	PM, T, HR	Yes
Winix	1 (KKMOON_W)	https://quantumspain.es/medidores-de-co2/	Dioxcare (Cubic CM1106)	T, HR	Yes
Redexia	1 (REDEX)		SenseAir LP8	-	No
CO2Panel	3 (CO2PAN_DA1... CO2PAN_DA3)	https://co2panel.shop/	CO2Panel Pi (MHZ19B)	-	Yes
Anaire	1 (ANAIRE_A) 1 (ANAIRE_B) 1 (ANAIRE_D) 1 (ANAIRE_E)	anaire.org	Anaire (SCD30 Sensirion) Anaire (SCD30 Sensirion. Calib. Forzada) Anaire (MHZ14A) Anaire (MZH19C)	T, RH	Yes
Mesura	9 (ARANET_0... ARANET_8)	https://www.aranet4.es/	Aranet (Sensirion Sunrise)	T, RH	Yes
	10 (KKMOON_0... KKMOON_9)	https://quantumspain.es/medidores-de-co2/	Kkmoon (SensAir S8)	T, RH	Yes
	5 (CO2PAN_0... CO2PAN_4)	https://co2panel.shop/	CO2Panel Pi (MHZ19A)	-	Yes
F. CEAM	1 (FC_1)	www.ceam.es	(EE893)	T, RH	No

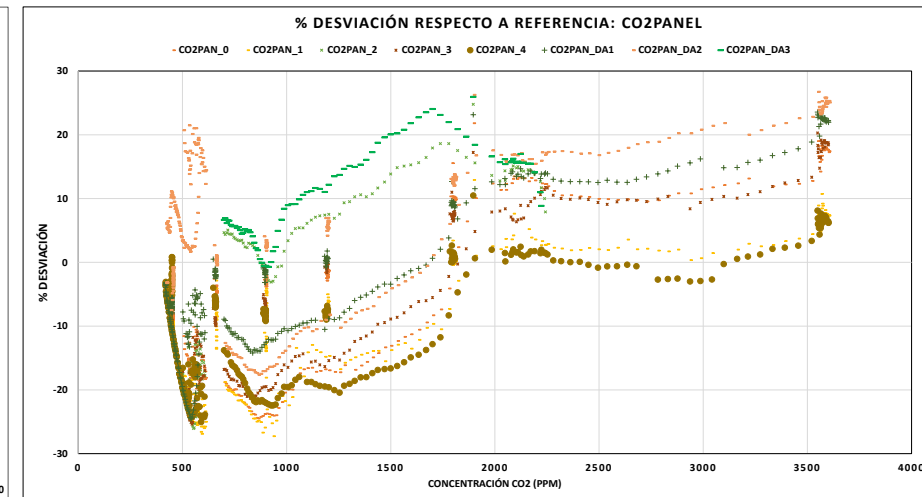
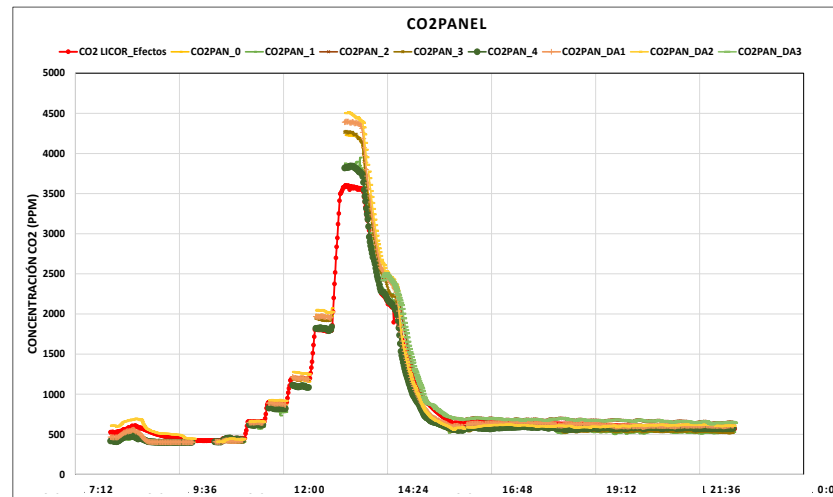
Resultados preliminares. Intercomparación COV-Os

- Se observa concordancia entre los instrumentos PTR-ToF-MS, mientras que los PTR-MS muestran peor correlación en experimentos de ozonólisis (mezcla compleja)
- La presencia de HR causa interferencia en algunos equipos y para algunos compuestos, aunque no con la misma tendencia
- Las técnicas off-line muestran buenas correlaciones en los experimentos de inyección de COV-Os directa, y peor respuesta en mezclas complejas (condiciones reales)



Resultados preliminares. Intercomparación sensores de CO₂

- Se observan desviaciones relativas respecto al sistema de referencia de hasta 25% en algunos sensores
- Dependencia en la determinación de CO₂ con la HR en algunos tipos de sensores
- El protocolo de calibración juega un papel importante
- Se observa cierta interferencia con Ozono, aunque a concentraciones por encima de valores típicos de condiciones reales. No se observa interferencia con NO₂

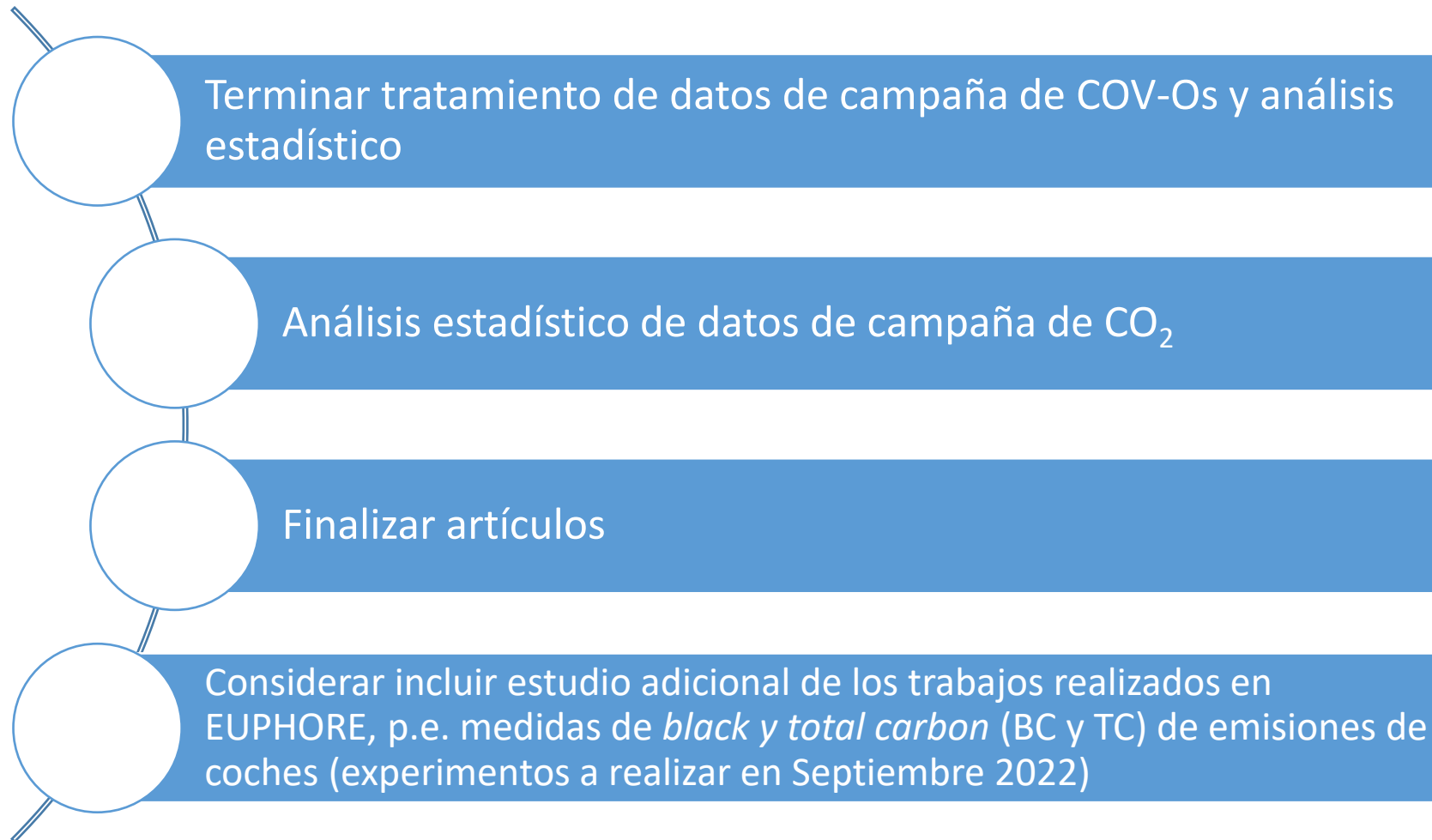


Ródenas et al., *Assessment on the performance of CO₂ low-cost sensors at the EUPHORE chambers*. En progreso

Ródenas* et al., *Review of low-cost sensors for indoor air quality: Features and applications*. Appl. Spectrosc. Rev., 2022 <http://dx.doi.org/10.1080/05704928.2022.2085734>.

*Trabajo adicional, no incluido en doctorado

Trabajo pendiente



Se planteará realizar la tesis por compendio de artículos. En tal caso, la fecha prevista sería de 1 – 1.5 años.

Gracias!

