

# INVESTIGACIÓN EN MARCHA

TESIS DOCTORAL  
CURSO 2022-23

DOCTORADO EN  
MEDIO AMBIENTE Y SOSTENIBILIDAD

UNIVERSIDAD MIGUEL HERNÁNDEZ DE ELCHE



PROGRAMA DE DOCTORADO EN  
MEDIO AMBIENTE Y SOSTENIBILIDAD



Evaluación de instrumentación, desde “bajo-coste” 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

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

Se plantean dos subtemas a desarrollar →

## Medidas de compuestos orgánicos volátiles oxigenados (COVOs) con instrumentación avanzada y sensores (LCS) para medidas de AQ.

Evaluar la calidad de los datos de distintos instrumentos y técnicas para la medida de COVOs.

Evaluar el comportamiento de distintos tipos de LCS.

Determinar linealidad y cuantificar interferencias con otros gases y en distintas condiciones ambientales.

Discutir la idoneidad e implicaciones del uso de las distintas técnicas en la determinación de COVOs, 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.

Recomendaciones de uso

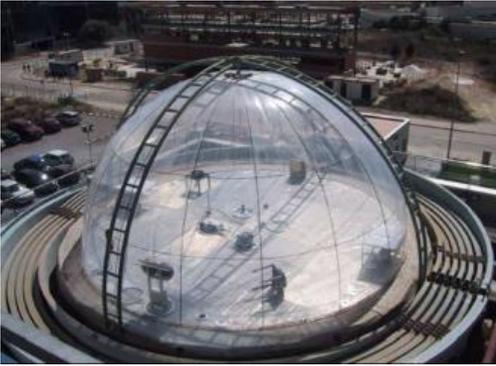
## Evaluación de contaminantes ambientales procedentes de actividades antropogénicas

Identificación de emisiones procedentes de la quema de biomasa (BB)

Estudio de la transformación de las emisiones en condiciones diurnas y nocturnas: fase gas (e.g. VOCs y COVOs) y partícula

Discusión de implicaciones en la calidad del aire, la salud y el cambio climático.

# Metodología: Recursos



Cámaras de simulación atmosférica EUPHORE del departamento de Química Atmosférica de la Fundación CEAM e instrumentación para medida de contaminantes en fase gas y particulada (e.g. PTR-ToF-MS, CIMS).

**Campaña:** medidas 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)

**Contexto:** Existen diferencias entre instrumentos para la medida de contaminantes. Es especialmente importante la caracterización de funcionamiento e interferencias en instrumentación avanzada desarrollada en los últimos años.



**Campaña:** medidas en EUPHORE para testeo de etalómetros y medidores de carbono negro y total bajo distintas fuentes de emisión: humos de coches y quema de biomasa (BB). Determinación de emisiones y sus transformaciones.

**Contexto:** La BB produce gran cantidad de gases y es una de las principales fuentes de material particulado, generando aerosoles orgánicos, carbono marrón y negro, dando lugar a nuevos productos. A pesar de su repercusión en la AQ, salud y cambio climático, existen importantes lagunas de conocimiento en los procesos químicos que gobiernan dicha actividad.



**Campaña:** evaluación del comportamiento de sensores de CO<sub>2</sub> en EUPHORE.

Sensores de bajo coste, e.g. CO, CO<sub>2</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, PM.

**Contexto:** La concentración de CO<sub>2</sub> se popularizó como indicador del riesgo de infección por COVID y se usa como indicador de la tasa de ventilación → relacionado con la calidad del aire interior



Bibliografía relacionada con la temática

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

# Estado actual. Mediciones COV-Os

✓ **Campaña experimental** 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 COVOs 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

✓ **Artículo**

- Análisis de datos de instrumentación EUPHORE finalizada
- Finalización de análisis estadísticos integrando toda la instrumentación
- Redacción en proceso

✓ Artículo: *Oxidation capacity changes in the atmosphere of large urban areas in Europe: Modelling and experimental campaigns in atmospheric simulation chambers*, Jung et al., Chemosphere, 2023

✓ Libro *A Practical Guide to Atmospheric Simulation Chambers*: Coautora en 2 capítulos: Preparation of Experiments: Addition and In Situ Production of Trace Gases and Oxidants in the Gas Phase; Analysis of Chamber Data

✓ Seminario: *Seminario sobre la calidad del aire en España "Millán Millán"*. UJI, online. Junio 2024.

✓ Seminario: *Calidad del aire en España: Nuevos retos*. Madrid, online. Abril 2024.

# Estado actual. Sensores de bajo coste

- ✓ **Campaña experimental** de intercomparación de LCS de CO<sub>2</sub> comerciales en EUPHORE realizada.

Condiciones: 400-3500 ppm CO<sub>2</sub> y 0-80% HR

38 LCS de CO<sub>2</sub> testados frente a referencia

Experimentos diseñados para el estudio de:

Linealidad y repetibilidad entre sensores

Dependencia de la HR

Posibles interferencias de otros gases

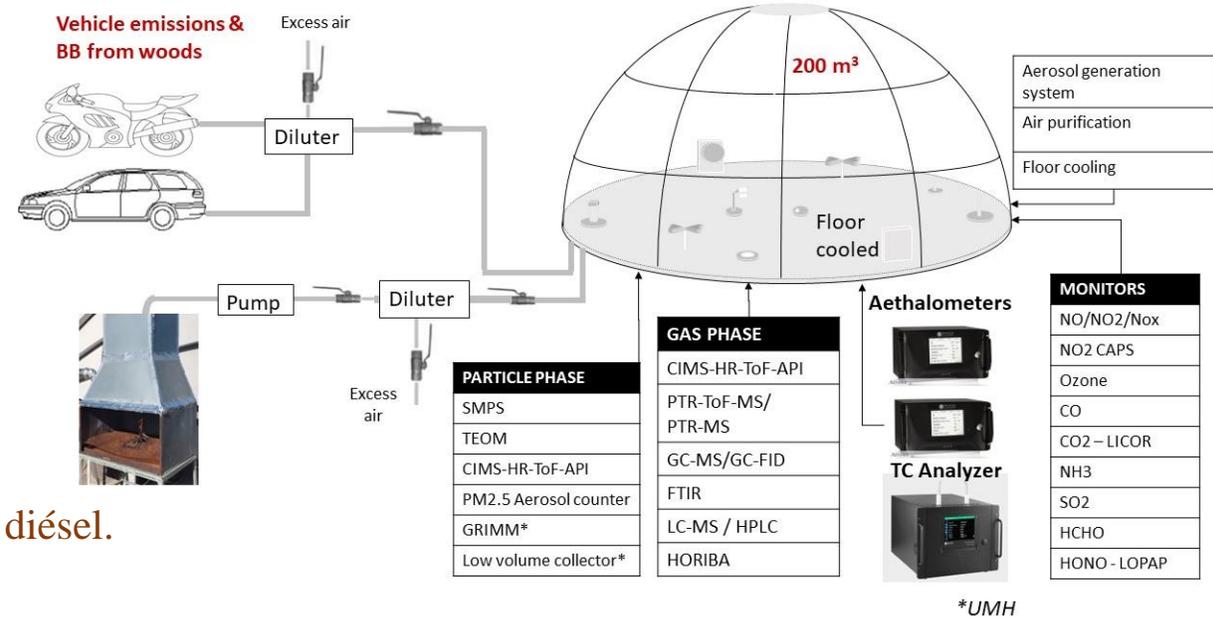
- ✓ **Artículo**
  - Análisis de datos finalizado
  - Tratamiento estadístico finalizado
  - Redacción avanzada

- ✓ **OTROS:** Medidas con sensores de PM2.5 en quemas de paja de arroz

**Tabla de sensores**

| Company /Particular | N. Sensors (Identifier)                                      | Website   | Brand (Sensor models)   | Other parameters | Background calibration |
|---------------------|--|---|---|------------------|------------------------|
| Neuer Weg           | 2 (NEU_INDOOR, NEU_OUTDOOR)                                  | <a href="https://www.neuerweg-group.com/">https://www.neuerweg-group.com/</a>                     | NW Virus Risk Alert<br>NW Outdoor AQ monitor  | PM, T, HR        | Yes                    |
| Sequopro            | 2 (SEQ_215, SEQ_217)   | <a href="http://www.sequopro.es">www.sequopro.es</a>  | ?   | PM, T, HR        | Yes                    |
| Winix               | 1 (KKMOON_W)   | <a href="https://quantumspain.es/medidores-de-co2/">https://quantumspain.es/medidores-de-co2/</a> | Dioxcare (Cubic CM1106)   | T, HR            | Yes                    |
| Redexia             | 1 (REDEX)  |   | SenseAir LP8  | -                | No                     |
| CO2Panel            | 3 (CO2PAN_DA1...<br>CO2PAN_DA3)                              | <a href="https://co2panel.shop/">https://co2panel.shop/</a>                                       | CO2Panel Pi (MHZ19B)  | -                | Yes                    |
| Anaire              | 1 (ANAIRE_A)<br>1 (ANAIRE_B)<br>1 (ANAIRE_D)<br>1 (ANAIRE_E) | <a href="http://anaire.org">anaire.org</a>  | Anaire (SCD30 Sensirion)<br>Anaire (SCD30 Sensirion.<br>Calib. Forzada)<br>Anaire (MHZ14A)<br>Anaire (MZH19C) | T, RH            | Yes                    |
| Mesura              | 9 (ARANET_O...<br>ARANET_B)                                  | <a href="https://www.aranet4.es/">https://www.aranet4.es/</a>                                     | Aranet (Sensirion Sunrise)  | T, RH            | Yes                    |
|                     | 10 (KKMOON_O...<br>KKMOON_9)                                 | <a href="https://quantumspain.es/medidores-de-co2/">https://quantumspain.es/medidores-de-co2/</a> | Kkmoon (SensAir S8)   | T, RH            | Yes                    |
|                     | 5 (CO2PAN_O...<br>CO2PAN_4)                                  | <a href="https://co2panel.shop/">https://co2panel.shop/</a>                                       | CO2Panel Pi (MHZ19A)  | -                | Yes                    |
| F. CEAM             | 1 (FC_1)   | <a href="http://www.ceam.es">www.ceam.es</a>  | (EE893)   | T, RH            | No                     |

# Estado actual. Quemada de biomasa (BB)



✓ **Campaña** realizada con la siguiente estrategia experimental:

- Quemada de madera de naranjo, haya y viñas & humos de motor diésel.
- Emisiones en las fases de llama y humo.
- Exposición de emisiones a condiciones día y noche: formación de productos y envejecimiento de partículas.

✓ **Artículo:** • Análisis de la fase gas y composición en partículas por finalizar.

- Redacción avanzada.

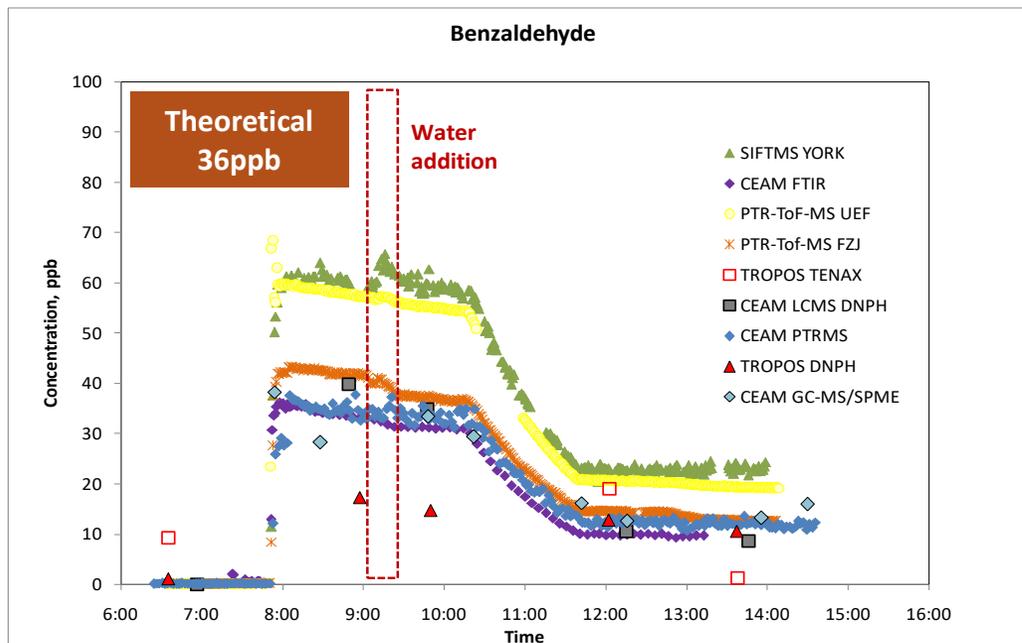
✓ **Congresos:**

- EAC, Sept 2023, Málaga: 1 como primera autora ponente y 3 como coautora (orales).
- ACTRIS Science Conf, Mayo 2024, Rennes: 1 como primera autora ponente y 1 como coautora (orales) y coautora en póster.
- ACTRIS Atmospheric Simulation Chamber Workshop, Marzo 2024, Wuppertal: 1 como primera autora ponente (oral).

✓ **OTROS: Proyecto ATMOBE.** Elaboración propuesta y parte de equipo investigador (*Understanding the atmospheric chemistry of BB emissions*). MICIN PID2022-142366OB-I00. 2023-2026.

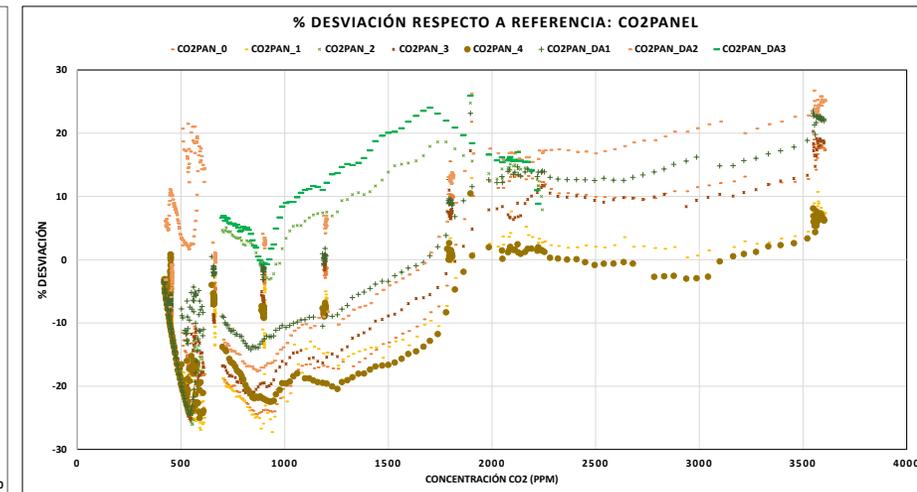
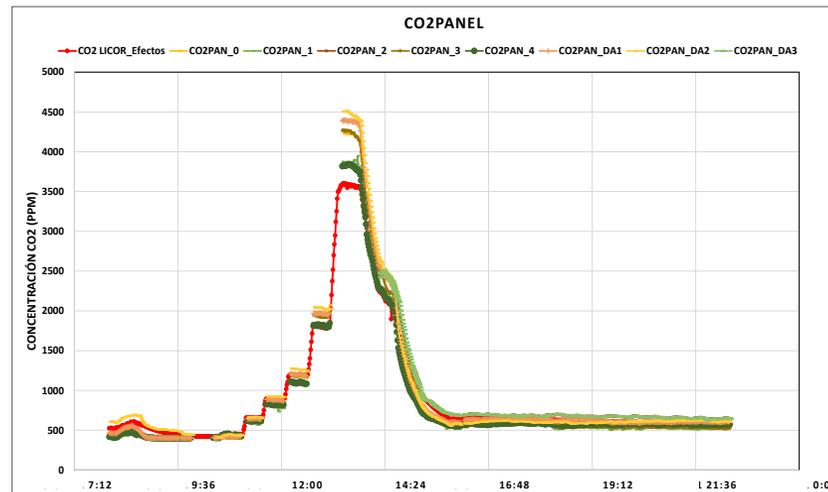
# Resultados preliminares. Intercomparación COVOs

- 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 CO<sub>2</sub>

- Se observan desviaciones relativas respecto al sistema de referencia de hasta 25% en algunos sensores
- Dependencia en la determinación de CO<sub>2</sub> 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 NO<sub>2</sub>



Ródenas et al., *Assessment on the performance of CO<sub>2</sub> 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>.

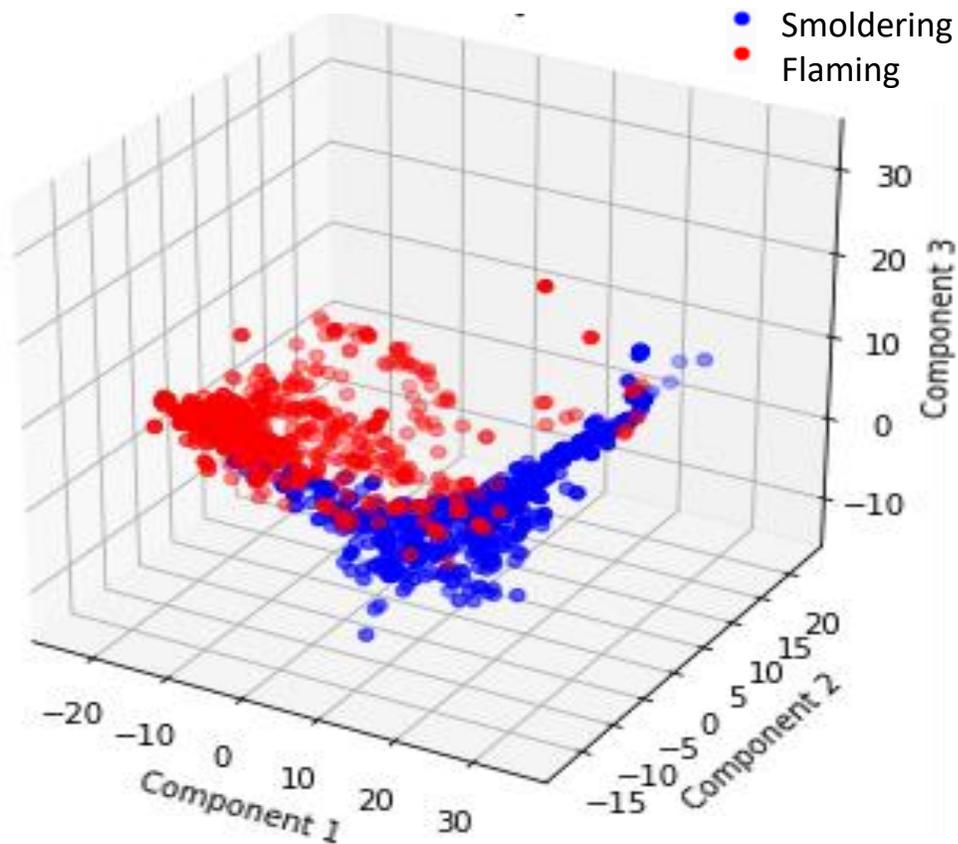
\*Trabajo adicional, no incluido en doctorado

# Resultados preliminares. Quema de biomasa

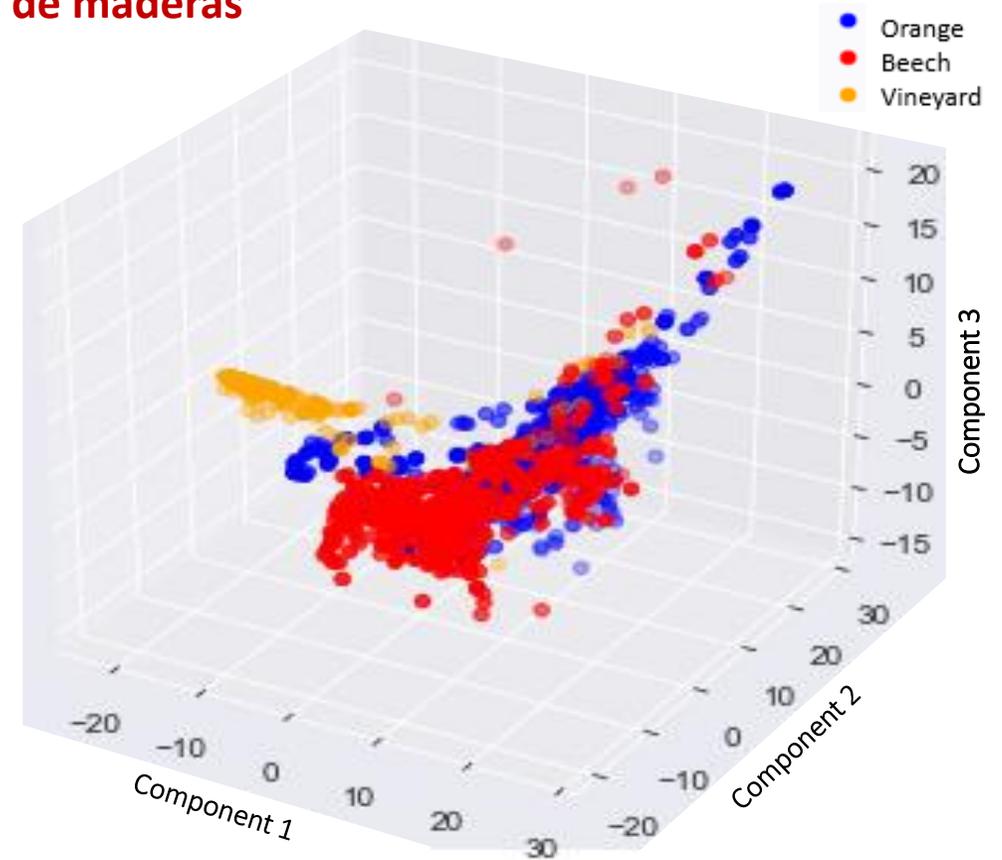
Composición química en fase gaseosa de la quema de biomasa.

Instrumento: PTR-ToF-MS (Proton transfer time of flight mass spectrometer)

Tipo de fase de combustion



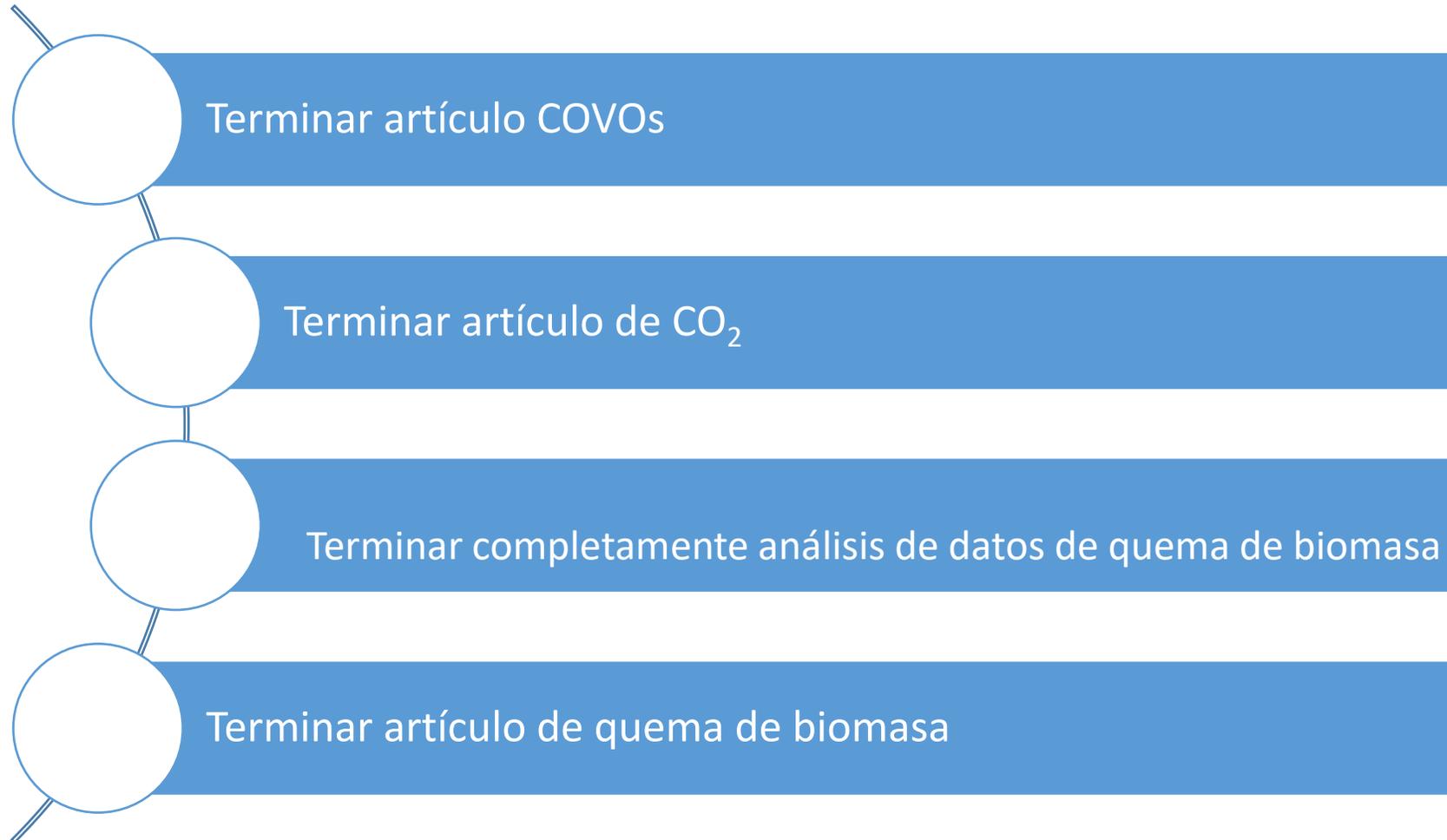
Tipo de maderas



Análisis por componentes principales. Diferencias cualitativas según el tipo de combustión y el tipo de madera quemada

# Trabajo pendiente

---



**GRACIAS!!**