INFORME INTERMEDIO DE PROYECTOS DE I+D+i

Como paso previo a la realización del informe, se ruega lean detenidamente las instrucciones de elaboración de los informes de seguimiento científico-técnico de proyectos disponible al final de este informe.
Se recomienda leer atentamente la información solicitada en los distintos apartados del informe, revisar la memoria y el presupuesto solicitado inicialmente y justificar adecuadamente todas aquellas actividades o gastos que haya sido necesario realizar para la consecución de los objetivos y que no estuvieran previstos o suficientemente detallados en la memoria inicial.

A. Datos del proyecto

Relacione los datos actuales del proyecto. En caso de que haya alguna modificación, indíquelo en la casilla A2

A1. Datos del proyecto		
Referencia proyecto	CGL2016-75725-R	
Título Proyecto	Modelización fotoquímica para atribuir fuentes y áreas de emisión a altas concentraciones de material particulado en zonas de España	
Investigador Principal 1	María Teresa Pay Pérez	
IP1	Researcher ID:	Código Orcid: 0000-0001-7985-9253
Investigador Principal 2*		
IP2	Researcher ID:	Código Orcid:
Entidad	Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación	
Centro	Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación	
Fecha de inicio	30/12/2016	
Fecha final	29/12/2019	
Duración	3 años	
Total concedido	118.580,00 €	

***** Rellenar si procede

A2. Descripción de modificaciones en los datos iniciales del proyecto *(Cambio de IP, entidad, centro, modificación del periodo de ejecución…)*
No ha habido modificaciones en los datos iniciales del proyecto. Transferencia recibida.

B. Personal activo en el proyecto

*Tiene que relacionar la situación de **todo** el personal de las entidades participantes que haya prestado servicio en el proyecto en el periodo que se justifica, o que no haya sido declarado anteriormente, y cuyos costes (dietas, desplazamientos, etc.) se imputen al mismo.*

B.1. Equipo de investigación

Incluido en la solicitud original

	Nombre	NIF/NIE	Función en el proyecto	Fecha de baja	Observaciones
1	María Teresa Pay Pérez	48447085T	Investigador principal		
2	Marc Guevara Vilardell	46411516T	Modelización de las emisiones para el cálculo de la contribución de fuentes		

No incluido en la solicitud original						
	Nombre	NIF/NIE	Función en el proyecto	Fecha de alta	Fecha de baja	Observaciones
1						
2						
B.2. Equipo de Trabajo						
	Nombre	NIF/NIE	Función en el proyecto	Inicio	Fin	Observaciones
1	Carles Tena Medina	53086582Y	Técnico superior informático para el desarrollo y mejora del modelo de emisiones HERMESv3.0 en entornos de supercomputación.	30/12/2016		
2	Francesca Macchia	Y5402128V	Técnico superior informático para mejora de la eficiencia computacional del sistema CALIOPE para contribución de fuentes.	30/04/2017		Contratación a cargo del proyecto
3	Sergey Napelenok	487940681	Asesor en la implementación e interpretación de los métodos de atribución de fuentes en el modelo de transporte químico CMAQ.	30/12/2016		
4	Leonor Tarrasón	XDB276408	Supervisión de los desarrollos en evaluación de emisiones de contaminantes	30/12/2016		
5	Claudio Belis	AS3348555	Supervisión en técnicas de contribución de fuentes y colaborador en tareas de evaluación.	30/12/2016		
6	Marisol Monterrubio	40565872J	Soporte técnico	30/12/2016	01/01/2017	Cambio de departamento por lo que ya no estará involucrada en el proyecto.

Nota: Cree tantas filas como necesite.

La solicitud de “Altas” y “Bajas” de nuevos investigadores en el **equipo de investigación** deben tramitarse de acuerdo con **las instrucciones de ejecución y justificación** expuesta en la página web del ministerio. La incorporación de personal que participe en el proyecto en el **equipo de trabajo** no necesita autorización por parte del ministerio, pero su actividad debe incluirse y justificarse en este informe.

C. Progreso y resultados del proyecto

C1. Desarrollo de los objetivos planteados *Describa los objetivos y el grado de cumplimiento de los mismos (porcentaje estimado respecto al objetivo planteado y, en su caso, indique lo que queda por realizar en cada uno de ellos).*	
Objetivo 1. Selección de los episodios de material particulado	Cumplimiento del 80%. Está pendiente la tarea de caracterización de episodios de contaminación en base a la composición química de material particulado (Tarea 1.2). La tarea de control de calidad de las observaciones de la composición química de material particulado de la red EBAS ha llevado más tiempo del esperado porque se han tenido que diseñar e implementar controles de calidad de los datos de observaciones.
Objetivo 2. Evaluación y mejoras del modelo	Cumplimiento del 80%. Queda pendiente la evaluación de la composición química del material particulado debido a los retrasos ocasionado por las tareas de control de calidad de los datos (Tarea 2.1).
Objetivo 3. Modelización de la atribución de fuentes	Cumplimiento del 50%. La Tarea 3.3 de este objetivo sobre implementación de método de contribución de fuentes se han avanzado 6 meses según el cronograma debido a la parada de otras tareas.
Objetivo 4. Gestión del proyecto y diseminación de los resultados	Cumplimiento del 50%. Dentro de las tareas de coordinación del proyecto se ha adaptado el cronograma de trabajo con la reestructuración de algunas tareas (e.j. Tareas 1.2, 2.1 y 3.3) sin que influya en la duración del proyecto.

Nota: Cree tantas filas como necesite

C2. Actividades realizadas y resultados alcanzados *Describa las actividades científico-técnicas realizadas para alcanzar los objetivos planteados en el proyecto. Indique para cada actividad los resultados alcanzados y los miembros del equipo que han participado.* ***Extensión máxima 2 páginas***	
Actividad 1. Selección de los episodios de contaminación [Objetivo1] **Tarea 1.1. Recopilación y tratamiento de las observaciones.** • Se ha recopilado los datos de calidad del aire procedentes de las redes europeas EIONET y EBAS. Los datos se han procesado a un formato común para poder ser analizados y almacenados de forma eficiente en la base de datos del BSC. Las series de datos se extiende del 1990 al 2017. **Fig. 1** muestra la distribución espacial de las estaciones. • Dada la incertidumbre de los datos, ha sido necesario aplicar filtros de control de calidad a los datos para realizar los análisis sobre datos fiables. Para meteorología, se han descargado y formateado las estaciones METAR. **Tarea 1.2. Selección y caracterización de episodios de contaminación.** • Se ha seleccionado el 2015 como referencia por ser el año más reciente con mayor número de datos validados. Se ha identificado episodios en donde el umbral de contaminación se excedió durante un mínimo de 4 horas seguidas. Se usaron estaciones EIONET (**Tarea 1.1)** que disponían de más del 75% de los datos horarios en un ciclo anual. **Fig. 2, 3 y 4** muestran los de episodios de contaminación identificados para los contaminantes O_3, NO_2 y PM10, respectivamente. Para el O_3, el umbral de 160 µg/m^3 fue superado en 67 estaciones de 8 comunidades autónomas, y fueron más frecuentes en los meses de junio y julio. Para el NO_2, el umbral de 160 µg/m^3 fue superado en 30 estaciones de 6 comunidades autónomas, y fueron más frecuentes en los meses de enero, noviembre y diciembre. Para el PM10, el umbral de 50 µg/m^3 fue superado en 71 estaciones de 13 comunidades autónomas, y fueron más frecuentes en los meses de enero, noviembre y diciembre.	Miembros del equipo participantes*: **M.T. Pay**
Actividad 2. Evaluación y mejoras del modelo [Objetivo2] **Tarea 2.1. Evaluación del modelo durante episodios** • Se ha desarrollo una herramienta de evaluación de modelos que simulan la composición atmosférica, llamada "Evaluation tool" (ET), que permite de forma robusta y optimizada el análisis de los resultados modelados y su comparación con las observaciones recopiladas en la Actividad 1. La ET está disponible en el repositorio git del BSC (https://goo.gl/wLGS3J). El protocolo de evaluación está en línea con el Programa Europeo Copernicus sobre evaluación regional (CAMS_84). • Simulación anual de referencia para el año 2015 usando recursos computaciones de la convocatoria competitiva de la Red Española de Supercomputación (ver apartado **C7**). • La simulación de referencia se ha evaluado frente a las observaciones de la Actividad 1 en diferentes aspectos descritas a continuación: (1) evaluación anual del año 2015 para la meteorología usando las estaciones METAR (**Fig. 5**), (2) evaluación anual del 2015 para la calidad del aire (**Fig. 6**), (3) evaluación del incremento de la resolución espacial en episodio de contaminación de NO_2 (**Fig. 7**). Estas evaluaciones han permitido establecer tareas de mejora (ver **Tarea 2.2)** y definir la configuración de nuestro sistema para el análisis de contribución de fuentes. Las estrategias de mejora y evaluación se han diseñado y discutido dentro del Departamento de Ciencias de la Tierra del BSC, en especial, se ha contado con la colaboración del Dr. Oriol Jorba, con más de 15 años de experiencia en modelización atmosférica. **Tarea 2.2. Mejora del rendimiento del sistema de calidad del aire.** • Optimización de la gestión y monitorización de sistema en plataformas de supercomputación. Para ello se ha implementado una herramienta en el sistema CALIOPE, llamado **auto-caliope**, basada el software autosubmit (https://www.bsc.es/research-and-development/software-and-apps/software-list/autosubmit). El proyecto prevé el uso recursos computacionales a través de	Miembros del equipo participantes*: **M.T. Pay** M. Guevara C. Tena F. Macchia L. Tarrasón

convocatorias competitivas (RES, PRACE), por ello auto-caliope nos permitirá hacer un uso más eficaz y eficiente de los recursos computacionales y una mayor rapidez en la obtención de resultados. F. Macchia y M.T. Pay han implementado estos desarrollos. • Mejoras en la modelización de emisiones. La nueva versión del modelo de emisiones **HERMESv3** incluye inventarios de emisiones globales y regionales que cubren diferentes fuentes (antropogénicas, quema de biomasa, volcanes) para diferentes años, en consonancia con el Programa Europeo Copernicus para emisiones (CAMS_81). HERMESv3 necesita gran capacidad de cálculo, por lo que se ha paralelizado por C. Tena. Ello ha permitido integrarlo en el sistema auto-caliope y hacer uso eficiente de los recursos computacionales. M. Guevara está preparando una publicación discutiendo las mejoras de HERMESv3 (ver apartado **D1**). HERMESv3 mejora las correlaciones temporales de las concentraciones de O_3 (de 0.57 a 0.59), NO_2 (de 0.32 a 0.43) y SO_2 (de 0.03 a 0.07). Los sesgos de NO_2 se reducen ligeramente (~1 µg/m^3), y aumentan para O_3 en la misma cantidad. HERMESv3 mejora la predicción de excedencias del umbral de información de O_3 (de 105/839 a 143/839). HERMESv3 muestra mayor detalle que su versión anterior en el sur de Europa y África (**Fig. 8**). • Mejoras en la modelización de la calidad del aire (respecto a la configuración de referencia **Tarea 2.1**). La lista de mejoras incluye: (1) actualización de la versión de CMAQv5.0.2, (2) especiación detallada de la composición química de aerosoles (AERO6), (3) aumento de la resolución vertical de 15 a 37 capas, (4) reemplazado del modelo MOZART4/GEOS por el producto de química global de Copernicus para las condiciones de contorno, (5) uso de ERA-Interim como condiciones iniciales y de contorno de la meteorología. Estas mejoras están alineadas con el Programa Europeo Copernicus sobre pronóstico regional de la calidad del aire (CAMS_50).	
Actividad 3. Modelización de la atribución de fuentes [Objetivo3] **Tarea 3.1. Modelización de la contribución de fuentes** • Se ha implementado el módulo de contribución de fuentes en auto-caliope para los principales sectores económicos (**Fig. 9** y regiones (**Fig. 10**) identificando las principales ciudades españolas. Esta tarea ha sido adelantada 6 meses y ha sido realizada con el soporte técnico de F. Macchia, y del grupo responsable del modelo HERMES (M. Guevara y C. Tena). **Tarea 3.2. Cuantificación de la contribución de fuentes durante episodios** • Con la implementación de la herramienta de contribución de fuentes se ha realizado el primer caso estudio para cuantificar el origen del O_3 durante episodios de contaminación. Este trabajo se ha presentado en 3 conferencias internacionales y en la revista *Atmospheric Chemistry and Physics Discussion* (apartados **D1** y **D2**). S. Napelenok ha contribuido a esta tarea. • La aplicación de esta técnica al material particulado está planificada para la segunda fase del proyecto y se contará con miembros de grupo de trabajo para su implementación y análisis (ej., C. Belis).	Miembros del equipo participantes*: **M.T. Pay** M. Guevara C. Tena F. Macchia S. Napelenok C. Belis
Actividad 4. Gestión del proyecto y diseminación de los resultados [Objetivo4] **Tarea 4.1: Gestión del proyecto.** • Con el soporte del Departamento de proyectos del BSC se ha seguido el desarrollo del proyecto y se han preparado los informes justificativos requeridos. El grupo de investigación se ha reunido quincenalmente para evaluar el progreso del proyecto y reajustar las tareas necesarias. Se ha implementado una herramienta para la gestión del proyecto (**Fig. 11**). **Tarea 4.2: Diseminación de resultados.** • Se han presentado los resultados del proyecto en 5 conferencias internacionales, 3 artículos de revisión por pares (2 en revisión, 1 en preparación), en 2 seminarios abiertos del BSC, 1 seminario en el master de la Universidad de Barcelona.	Miembros del equipo participantes*: **M.T. Pay** M. Guevara

Notas: Cree tantas filas como necesite. En caso de incluir figuras, cítelas en el texto e insértelas en la última página
*Resalte en negrita las actividades realizadas por el /los IPs

C3. Problemas y cambios en el plan de trabajo
Describa las dificultades y/o problemas que hayan podido surgir durante el desarrollo del proyecto. Indique cualquier cambio que se haya producido respecto a los objetivos o el plan de trabajo inicialmente planteado, así como las soluciones propuestas para resolverlos. ***Extensión máxima 1 página***

La **Tarea 1.2** se retrasó porque el control de calidad de las observaciones de la composición química de material particulado (EBAS) resultó ser crítico para la interpretación de los datos. Se han diseñado e implementado controles de calidad de datos de calidad del aire. Esto no se contempló en el proyecto, pero se ha llevado a cabo sin ningún sobre coste en el proyecto, haciendo uso de los recursos de otro proyecto con igual finalidad.

El retraso de la **Tarea 1.2** permitió adelantar en parte las **Tareas 2.1, 2.2 y 3.1**, puesto que existe cierta independencia. Este plan de contingencia ha permitido que el proyecto sigua su planificación y duración inicial.

Se ha extendido el uso de técnicas de contribución de fuentes al estudio del origen de la contaminación por ozono. Esto ha sido posible gracias a que se ha incorporado al grupo de trabajo un estudiante FPI financiado en el marco de este proyecto. Esta posibilidad también se contempló en el plan de trabajo inicial. En este objetivo de averiguar las causas de la contaminación por ozono en España, se está trabajando en colaboración con Xavier Querol del CSIC y Gotzon Gangoiti de la Universidad de País Vasco.

C4. Colaboraciones con otros grupos de investigación directamente relacionadas con el proyecto
Relacione las colaboraciones con otros grupos de investigación y el valor añadido que aportan al proyecto. Describa, si procede, el acceso a equipamientos y/o infraestructuras de otros grupos o instituciones.

1. US Environmental Protection Agency (US-EPA): el grupo mantiene una colaboración con Sergey Napelenok en el uso de técnicas de contribución de fuentes.
2. Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA, France): el grupo mantiene una estrecha colaboración con la Dr. Isabelle Coll en la modelización de la dinámica urbana y su impacto en la calidad del aire.
3. NASA Goddard Institute for Space Studies (NASA-GISS; USA): el grupo mantiene una estrecha colaboración con el Dr. Kostas Tsigaridis en la modelización de aerosoles y el estudio del efecto directo de los aerosoles en la radiación.
4. University of California Irvine (UCI; USA): el grupo mantiene estrecha colaboración con el equipo de investigación del Dr. Donald Dabdub en la modelización de aerosoles secundarios y especialmente aerosoles orgánicos.
5. AEMET Izaña Atmospheric Research Center (Spain): el equipo del Dr. Emilio Cuevas mantiene una estrecha colaboración con el grupo de investigación con especial interés en la predicción de tormentas de polvo en el Norte de África.
6. CSIC-Institute of Environmental Assessment and Water Research (Spain): el equipo del Dr. Xavier Querol mantiene una colaboración con la modelización de la calidad del aire y particularmente en la modelización de ozono y aerosoles.

C5. Colaboraciones con empresas o sectores socioeconómicos directamente relacionados con el proyecto. *Relacione las colaboraciones con empresas o sectores socioeconómicos y el valor añadido que aportan al proyecto.*

- El sistema de modelización en desarrollo en el presente proyecto se emplea para generar predicciones de calidad del aire en España (www.bsc.es/caliope)
- La Generalitat de Catalunya es un usuario diario de los pronósticos de calidad para Cataluña. También se está colaborando con la Generalitat en diferentes estudios de evaluación de los impactos de la calidad del aire usando sistema CALIOPE y las técnicas de contribución de fuentes aquí desarrolladas.

C6. Actividades de formación y movilidad de personal directamente relacionadas con el proyecto *Indique las actividades de formación y movilidad de personal relacionadas con el desarrollo del proyecto. Describa, además, si procede, las actividades realizadas en colaboración con otros grupos o con actividades de formación en medianas o grandes instalaciones.*

	Nombre	**Tipo de personal** (*becario, técnico, contratado con cargo al proyecto, posdoctoral, otros*)	**Descripción de las actividades de formación o motivo de la movilidad**
1	Carles Tena Medina	Técnico, grupo de trabajo	Curso en "Parallel I/O and Portable Data Formats" (https://events.prace-ri.eu/event/704/). Organizado por Jülich Supercomputing Centre. Jülich (Alemania). Marzo del 12-14, 2018.
2	Francesca Macchia	Técnico, contratado con cargo al proyecto	Curso en "Parallel I/O and Portable Data Formats" (https://events.prace-ri.eu/event/704/). Organizado por Jülich Supercomputing Centre. Jülich (Alemania). Marzo del 12-14, 2018.

Nota: Cree tantas filas como necesite

C7. Actividades de internacionalización y otras colaboraciones relacionadas con el proyecto *Indique si ha colaborado con otros grupos internacionales. Consigne si ha concurrido, y con qué resultado, a alguna convocatoria de ayudas (proyectos, formación, infraestructuras, otros) de programas europeos y/o otros programas internacionales, en temáticas relacionadas con la de este proyecto. Indique el programa, socios, países y temática y, en su caso, financiación recibida.*

Durante esta primera fase del proyecto, **M.T. Pay** y M. Guevara han participado en diferentes contratos del Programa Europeo Copernicus para la monitorización de la composición química (CAMS, https://www.youtube.com/watch?time_continue=2&v=MGJss4lDaBo). La participación en estos proyectos ha aportado un mejor conocimiento y acceso al estado del arte en evaluación de modelos (CAMS_84), emisiones (CAMS_81) y modelización de la calidad del aire en Europa (CAMS_50). A continuación, se detalla los proyectos donde se está participando actualmente:

1. Proyecto: Copernicus Atmospheric Monitoring System - Regional production Service (CAMS-50).
Programa: Copernicus - European Union's Earth Observation Programme
Organismo financiador: Unión Europea
Socios: total 12. French national meteorology and climate service (Meteo-France), French National Institute for Industrial Environment and Risks (INERIS), Finnish Meteorological Institute (FMI), Forschungszentrum Julich GmbH - Institute of Energy and Climate Research – Troposphere (FZJ-IEK8), Royal Netherlands Meteorological Institute (KNMI), Netherlands Organization for Applied Scientific Research (TNO), Norwegian Meteorological Institute (Met Norway), Swedish Meteorological and Hydrological Institute (SMHI), Aarhus University (AU), The Institute of Environmental Protection – National Research Institute

(IEP-NRI), Italian National Agency for New Technologies, Energy and Sustainable Economic Development (ENEA), BSC.
Investigador Principal: Gäelle Collin (Meteo-France)
Periodo: 3 años (fecha de inicio pendiente)

2. Proyecto: Copernicus Atmospheric Monitoring System – Global and Regional Emissions (CAMS-81).
Programa: Copernicus - European Union's Earth Observation Programme
Organismo financiador: Unión Europea
Socios: total 9. National Center for Scientific Reseach (CNRS), TNO, Met Norway, Charles University (CUNI), FMI, BSC, Max-Planck Institute for Chemistry (MPIC), Environment Agency Austria (EAA), Chalmers University of Technology (Chalmers)
Investigador Principal: Claire Granier (CNSR)
Periodo: 3 años (01/09/2017 – 01/09/2020)

3. Proyecto: Copernicus Atmospheric Monitoring System – Global and regional a posteriori evaluation and quality assurance (CAMS-84)
Programa: Copernicus - European Union's Earth Observation Programme
Organismo financiador: Unión Europea
Socios: total 14. Royal Netherlands Meteorological Institute (KNMI), Academy of Athens (AA), AU, Aristotle University of Thessaloniki (AUTH), Institut d'Aéronomie spatiale de Belgique (BIRA-IASB), BSC/AEMET, Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environment (CEA-LSCE), Centre National de la Recherche Scientifique et Université Paul Sabatier – Laboratoire d'Aérologie (CNRS-LA), Deutscher Wetterdienst – Hohenpeissenberg Meteorological Observatory (DWD), Institute of Environmental Physics- University of Bremen (IUP-UB), Met Norway, Max-Planck Institute for Meteorology (MPG), Science and Technology (S&T), and University Bremen Campus Gmbh (UBC).
Investigador Principal: Henk Eskes and Jacques Claas (KNMI)
Periodo: 3 años (fecha de inicio 01/10/2018)

A nivel europeo, también se participa en el *Forum for Air quality Modelling* (FAIRMODE). Marc Guevara es co-chair del grupo de trabajo en emisiones urbanas. Ha participado en todas las reuniones plenarias y técnicas: http://fairmode.jrc.ec.europa.eu/news.calendar.html

Se ha concurrido en convocatorias nacionales competitivas para obtener recursos computacionales para la modelización fotoquímica de atribución de fuentes y áreas de emisión en episodios de contaminación en zonas de España. En concreto, la Red Española de supercomputación (RES) concedió un acceso de 300.000 horas de supercomputación (Referencia: AECT–2017–1–0008) a **M.T. Pay** para realizar simulaciones de la **Tarea 2.1** de PAISA.

D. Difusión de los resultados del proyecto

Nota: Relacione **únicamente** los resultados derivados de este proyecto.

D1. Publicaciones científico-técnicas (SCI) y patentes directamente derivadas de los resultados del proyecto. *Indicar si las patentes están licenciadas y/o en explotación.*

Autores, título, referencia de la publicación*…

1. **Pay, M. T.**, Gangoiti, G., Guevara, M., Napelenok, S., Querol, X., Jorba, O., and Pérez García-Pando, C.: Ozone source apportionment during peak summer events over southwestern Europe, Atmos. Chem. Phys. Discuss., https://doi.org/10.5194/acp-2018-727, in review, 2018. Available at: https://www.atmos-chem-phys-discuss.net/acp-2018-727/ . Open Access.

2. **Pay, M.T.**, 2018. Pérez García-Pando, C., Guevara, M., Jorba, O., Napelenok, S., and Querol, X.: Unravelling the origin of high ozone concentration in southwestern Europe, Air Pollution Modeling and its Application XXVI, in review, 2018.

3. Guevara, M.G., Tena, C., Jorba, O., García-Pando, C.: A stand-alone multiscale atmospheric emission model (HERMESv3). Part 1: global and regional module. In preparation.

*Resalte en negrita las realizadas por el /los IPs

D2. Asistencia a congresos, conferencias o workshops relacionados con el proyecto

Nombre del congreso, tipo de comunicación (invitada, oral, póster), autores.

1. **Pay, M.T**.; García-Pando, C.; Guevara, M.; Napelenok, S.; Querol, X.: Unravelling the origin of high ozone concentrations in southwestern Europe. 36th International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application. Comunicación oral. Ottawa (Canadá). Mayo, 14-18, 2018.

2. **Pay, M.T.**; García-Pando, C.; Guevara, M.; Napelenok, S.; Querol, X.: A source apportionment assessment of ozone concentration in peak summer events over southwestern Europe. International Air Quality Conference. Comunicación oral. Barcelona (España). Marzo, 12-16, 2018.

3. **Pay, M.T.**; García-Pando, C.; Guevara, M.; Napelenok, S.; Querol, X.: A source apportionment assessment of ozone concentrations in peak summer events over southwestern Europe. 26th ACCENT/GLOREAM Workshop. Comunicación oral. Berlin (Alemania). Noviembre, 27-29, 2017.

4. Colette, A.; Aas, W.; Banin, L.; Braban, C. F.; Ferm, M.; González-Ortiz, A.; Ilyin, I.; Mar, K.; Pandolfi, M.; Putaud, J.P.; Shatalov, V.; Solberg, S.; Spindler, G.; Tarasova, O.; Vana, M.; Adani, M.; Almodovar, P.; Berton, E.; Bessagnet, B.; Bohlin-Nizzetto, P.; Boruvkova, J.; Breivik, K.; Briganti, G.; Cappelletti, A.; Cuvelier, C.; Derwent, R.; D'Isidoro, M.; Fagerli, H.; Funk, C.; Garcia-Vivanco, M.; Haeuber, R.; Hueglin, C.; Jenkins, S.; Kerr, J.; de Leeuw, F.; Lynch, J.; Manders, A.; Mircea, M.; **Pay, M.T.**; Pritula, D.; Querol, X.; Raffort, V.; Reiss, I.; Roustan, Y.; Sauvage, S.; Scavo, K.; Simpson, D.; Smith, R.I.; Tang, Y; Theobald, M.; Tørseth, K.; Tsyro, S.; van Pul, A.; Vidic, S.; Wallasch, M.; Wind, P.: Eurodelta-Trends, a multi-model experiment of air quality hindcast in Europe over 1990-2010. 26th ACCENT/GLOREAM Workshop. Comunicación oral. Berlin (Alemania). Noviembre, 27-29, 2017.

5. Mark, R.T.; Aas, W.; Andersson, C.; Bessagnet, B.; Ciarelli, G.; Colette, A.; Couvidat, F.; Cuvelier, K.; Fagerli, H.; Manders, A.; Mar, K.; Mircea, M.; Otero, N.; **Pay, M.T.**; Raffort, V.; Roustan, Y.; Schaap, M.; Tsyro, S.; Vivanco, M.G.; Wind, P: An intercomparison of modelled trends of nitrogen and sulphur wet deposition in Europe over the period 1990-2010 in the framework of the EURODELTA/TFMM trend modelling exercise. 18th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes. Comunicación oral. Bologna (Italia). Octubre, 9-12, 2017.

6. Mircea, M.; Bessagnet, B.; Vivanco, M.G.; Cuvelier, C.; Pirovano, G.; Tsyro, S.; Aksoyoglu, S.; Manders, A.; **Pay, M.T.**; Stern, R.; Aas, W.; Prévôt, A.S.H.; Aulinger, A.; Baldasano, J.M.; Bieser, J.; Briganti, G.; Calori, G.; Cappelletti, A.; Carnevale, C.; Ciarelli, G.; Colette, A.; Couvidat, F.; D'Isidoro, M.; Dupont, J.C.; Fagerli, H.; Finardi, S.; Gonzalez, L.; Kranenburg, R.; Meleuxm, F.; Menut, L.; Roberts, P.; Rouïl, L.; Silibello, C.; Theobald, M.R.; Thunis, P.; Ung, A.; White, L.: Evaluation of seven chemistry transport models in the framework of EURODELTA III intercomparison exercise. 18th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes. Oral communication. Bologna (Italia). Octubre, 9-12, 2017.

7. Guevara, M., Tena, C., Serradell, K., Soret, A., Cárdenas, B., Rivera, O., Jaimes-Palomera, M., Camacho, P.: An emission processing system for the Mexico City metropolitan area: Evaluation and comparison of the MOBILE6.2-Mexico and MOVES-Mexico traffic emissions. 18th Global Emission Initiative (GEIA) Conference. Comunicación oral. Hamburg (Alemania). Septiembre, 13-15, 2017.

D3. Tesis doctorales finalizadas relacionadas con el proyecto
Nombre del doctor, director de tesis, título, calificación, organismo…
N/A

D4. Otras publicaciones derivadas de colaboraciones mantenidas durante la ejecución del proyecto y que pudieran ser relevantes para el mismo, así como artículos de divulgación libros, conferencias…
Autores, título, referencia de la publicación…

1. Otero, N., Sillmann, J., Mar, K. A., Rust, H. W., Solberg, S., Andersson, C., Engardt, M., Bergström, R., Bessagnet, B., Colette, A., Couvidat, F., Cuvelier, C., Tsyro, S., Fagerli, H., Schaap, M., Manders, A., Mircea, M., Briganti, G., Cappelletti, A., Adani, M., D'Isidoro, M., **Pay, M.-T.**, Theobald, M., Vivanco, M. G., Wind, P., Ojha, N., Raffort, V., and Butler, T.: A multi-model comparison of meteorological drivers of surface ozone over Europe, Atmos. Chem. Phys., 18, 12269-12288, https://doi.org/10.5194/acp-18-12269-2018, 2018. Open Access.

2. Vivanco, M.G., M.R. Theobald, H. García-Gómez, J.L. Garrido, M. Prank, W. Aas, M. Adani, U. Alyuz, C. Andersson, R. Bellasio, B. Bessagnet, R. Bianconi, J. Bieser, J. Brandt, G. Briganti, A. Cappelletti, G. Curci, J. H. Christensen, A. Colette, F. Couvidat, C. Cuvelier, M. D'Isidoro, J. Flemming, A. Fraser, C. Geels, K. M. Hansen, C. Hogrefe, U. Im, O. Jorba, N. Kitwiroon, A. Manders, M. Mircea, N. Otero, **M.-T. Pay**, L. Pozzoli, E. Solazzo, S. Tsyro, A. Unal, P. Wind and S. Galmarini (2018). Modeled deposition of nitrogen and sulfur in Europe estimated by 14 air quality model systems: evaluation, effects of changes in emissions and implications for habitat protection. Atmospheric Chemistry and Physics, 18, 10199-10218, doi: 10.5194/acp-18-10199-2018. Open Access.

3. Trombetti, M., P. Thunis, B. Bessagnet, A. Clappier, F. Couvidant, M. Guevara, J. Kuenen and S. Lopez-Aparicio (2018). Spatial inter-comparison of top-down emission inventories in European urban areas. Atmospheric Environment, 173, 142-156, doi: 10.1016/j.atmosenv.2017.10.032.

4. Colette, A., C. Andersson, A. Manders, K. Mar, M. Mircea**, M.-T. Pay**, V. Raffort, S. Tsyro, C. Cuvelier, M. Adani, B. Bessagnet, R. Bergström, G. Briganti, T. Butler, A. Cappelletti, F. Couvidat, M. D'Isidoro, T. Doumbia, H. Fagerli, C. Granier, C. Heyes, Z. Klimont, N. Ojha, N. Otero, M. Schaap, K. Sindelarova, A.I. Stegehuis, Y. Roustan, R. Vautard, E. van Meijgaard, M.G. Vivanco and P. Wind (2017). EURODELTA-Trends, a multi-model experiment of air quality hindcast in Europe over 1990-2010. Geoscientific Model Development, 10, 3255-3276, doi: 10.5194/gmd-10-3255-2017. Open Access

5. Guevara, M., C. Tena, A. Soret, K. Serradell, D. Guzmán, A. Retama, P. Camacho, M. Jaimes-Palomera and A. Mediavilla (2017). An emission processing system for air quality modelling in the Mexico City metropolitan area: Evaluation and comparison of the MOBILE6.2-Mexico and MOVES-Mexico traffic emissions.Science of The Total Environment, 584-585, 882-900,

6. Guevara, M., López-Aparicio, S., Cuvelier, C., Tarrason, L., Clappier, A., Thunis, P. (2017). A benchmarking tool to screen and compare bottom-up and top-down atmospheric emission inventories. Air Quality, Atmosphere & Health, 10, 627-642, doi:10.1007/s11869-016-0456-6. (FAIRMODE)

7. Lopez-Aparicio, S., M. Guevara, P. Thunis, C. Cuvelier and L. Tarrason (2017). Assessment of discrepancies between bottom-up and regional emission inventories in Norwegian urban areas. Atmospheric Environment, 154, 285-296, doi:10.1016/j.atmosenv.2017.02.004. (FAIRMODE)

8. Vivanco, M., B. Bessagnet, C. Cuvelier, M.R. Theobald, S. Tsyro, G. Pirovano, A. Aulinger, J. Bieser, G. Calori, G. Ciarelli, A. Manders, M. Mircea, S. Aksoyoglu, G. Briganti, A. Cappelletti, A. Colette, F.

Couvidat, M. D'Isidoro, R. Kranenburg, F. Meleux, L. Menut, **M.T. Pay**, L. Rouïl, C. Silibello, P. Thunis and A. Ung (2017). Joint analysis of deposition fluxes and atmospheric concentrations of inorganic nitrogen and sulphur compounds predicted by six chemistry transport models in the frame of the EURODELTAIII project. Atmospheric Environment, 151, 152-175, doi:10.1016/j.atmosenv.2016.11.042.

E. Gastos realizados hasta la mitad del periodo de ejecución del proyecto

Debe cumplimentarse este apartado **independientemente** de la justificación económica anual enviada por la entidad. Se deben incluir los principales conceptos de gastos con su importe, no el desglose de las facturas del proyecto, para valorar su adecuación a los objetivos y actividades realizadas en el proyecto. Es **indispensable** especificar si el gasto estaba previsto en la solicitud original.

E1. Gastos de personal (indique número de personas, situación laboral y función desempeñada en el proyecto)					**Previsto en la sol. original (S/N)**
	Nombre	**Situación laboral**	**Función desempeñada**	**Importe**	
1	Francesca Macchia	Contratada	Mejora de la eficiencia computacional del sistema CALIOPE para contribución de fuentes.	51.090,64	S
2					
Total gastos de personal:					51.090,64 €

Nota: Cree tantas filas como necesite

E2. Material inventariable (describa el material adquirido)				
	Equipo	**Descripción del equipo**	**Importe**	**Previsto en la sol. original (S/N)**
1	DELL COMPUTER, S.A	Equipo para la investigadora contratada monitor y torre de sobremesa	972.91	S
2				
Total gastos material inventariable				972.91€

Nota: Cree tantas filas como necesite

E3. Material fungible (describa el tipo de material por concepto o partida, p. ej., reactivos, material de laboratorio, consumibles informáticos, etc.)			
	Concepto	**Importe**	**Previsto en la sol. original (S/N)**
1			
2			
Total gastos material fungible			

Nota: Cree tantas filas como necesite

E4. Viajes y dietas (describa la actividad del gasto realizado y **<u>las personas que han realizado la actividad)</u>**. Debe incluir aquí los gastos derivados de la asistencia a congresos, conferencias, colaboraciones, reuniones de preparación de propuestas relacionados con este proyecto, etc.)					
	Concepto	**Relación con el proyecto**	**Importe**	**Nombre del participante**	**Previsto en sol. original (S/N)**
1	XXVI GLOREAM WORKSHOP | BERLIN (Germany) | Nov 27 2017	Presentación de resultados preliminares del proyecto PAISA relacionados con la evaluación del modelo y mejoras	374,63	Oriol Jorba Casellas	N

	12:00AM | Nov 29 2017 12:00AM				
2	XXVI GLOREAM WORKSHOP | BERLIN (Germany) | Nov 27 2017 12:00AM | Nov 29 2017 12:00AM	Presentación de primeros resultados de PAISA relacionados con el objetivo 3.	421,58	María Teresa Pay	S
3	EURODELTA DISCUSSION ON MODELING PRACTICES | PARIS (France) | Nov 13 2017 12:00AM | Nov 14 2017 12:00AM	Presentación de los resultados del proyecto relacionados con el objetivo 1 and 2.	335,51	María Teresa Pay	S
Total viajes y dietas					1131.72€

Nota: Cree tantas filas como necesite

E5. Otros gastos (describa la actividad del gasto por concepto, y si procede, las personas que han realizado la actividad)

	Concepto	**Relación con el proyecto**	**Importe**	**Nombre del participante**	**Previsto en la sol. original (S/N)**
1	Registro para la Conferencia "AIR QUALITY 2018", 12-16, MARZO, 2018. Gestionado por MANNERS CONGRESSOS, S.L,.	Presentación de primeros resultados de PAISA relacionados con el objetivo 3.	430,47	María Teresa Pay	S
2					
Total otros gastos					430,47€

Nota: Cree tantas filas como necesite

E6. Descripción de gastos no contemplados en la solicitud original (si ha realizado algún gasto no contemplado en la solicitud original, justifique la necesidad de su ejecución en este apartado)

Gasto	**Justificación**

Nota: Cree tantas filas como necesite

E7. Total ejecutado (costes directos únicamente)

Importe total concedido	**98.000,00€**
Importe total ejecutado durante el periodo	**53.625,74€**

Figuras

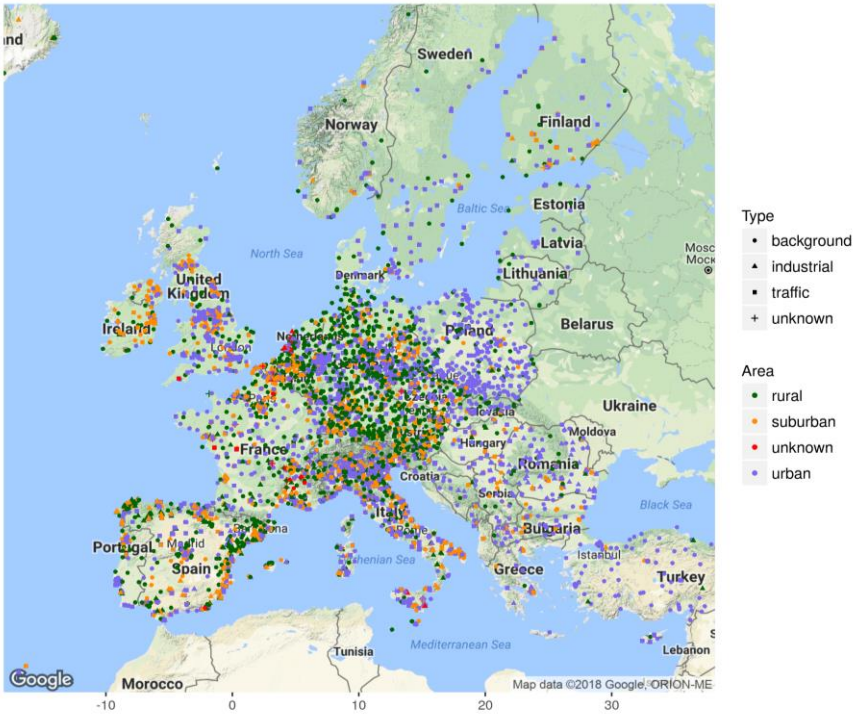


Figura 1: Red de estaciones EIONET (European Environment Information and Observation Network) sobre Europa que miden concentraciones de calidad del aire (O_3, NO_2, SO_2, PM10 y PM2.5). El color indica el tipo de área (rural, suburban, urbana y no clasificada). La forma indica el tipo de localización (background, industrial, traffic y no clasificada).

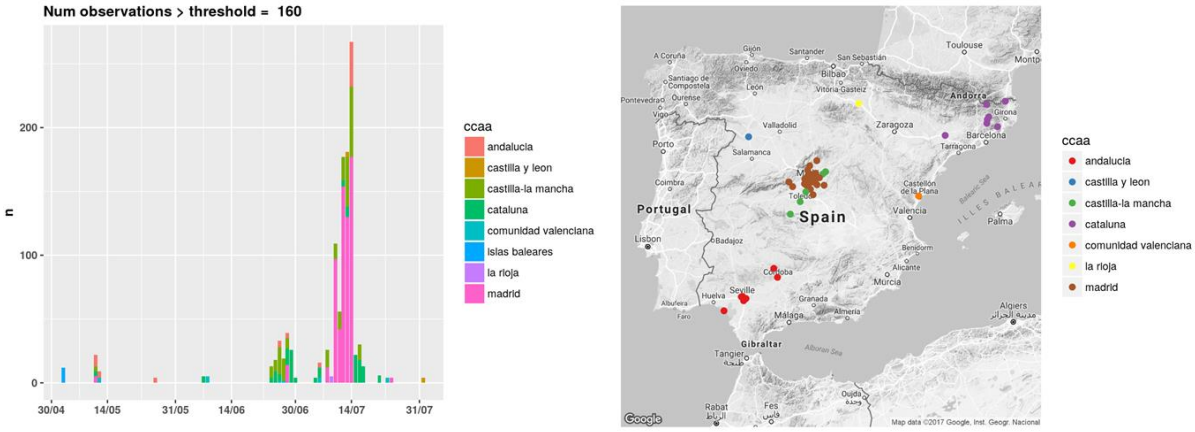


Figura 2: Izquierda, número de excedencias (n) del umbral 160 µg/m^3 para las concentraciones de O_3 observadas en la red española de EIONET, durante el periodo con mayor número de excedencias de 2015 (mayo-julio). Derecha, localización de las estaciones con excedencias. Los colores indican las comunidades autónomas con excedencias.

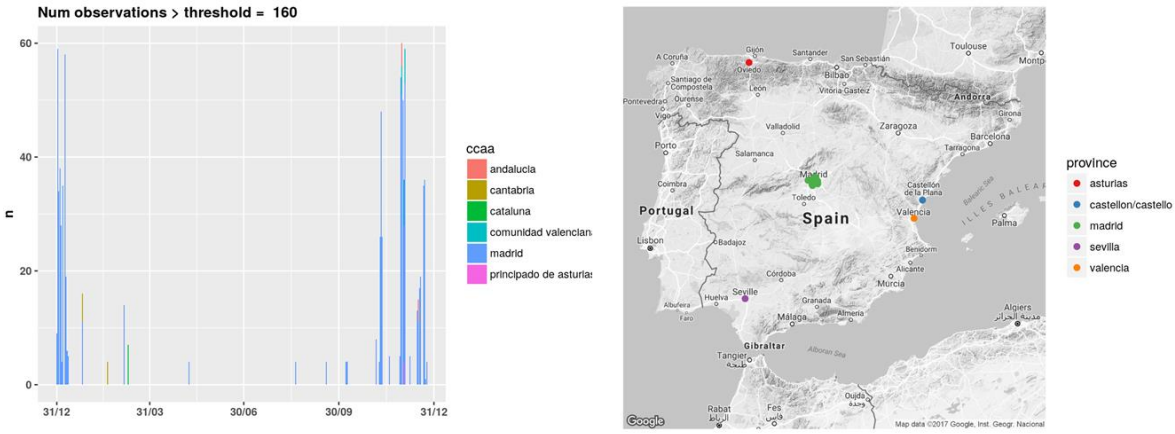


Figura 3: Izquierda, número de excedencias (n) del umbral 160 µg/m^3 para las concentraciones de NO_2 observadas en la red española de EIONET, durante el todo el año 2015. Derecha, localización de las estaciones con excedencias. Los colores indican las comunidades autónomas con excedencias.

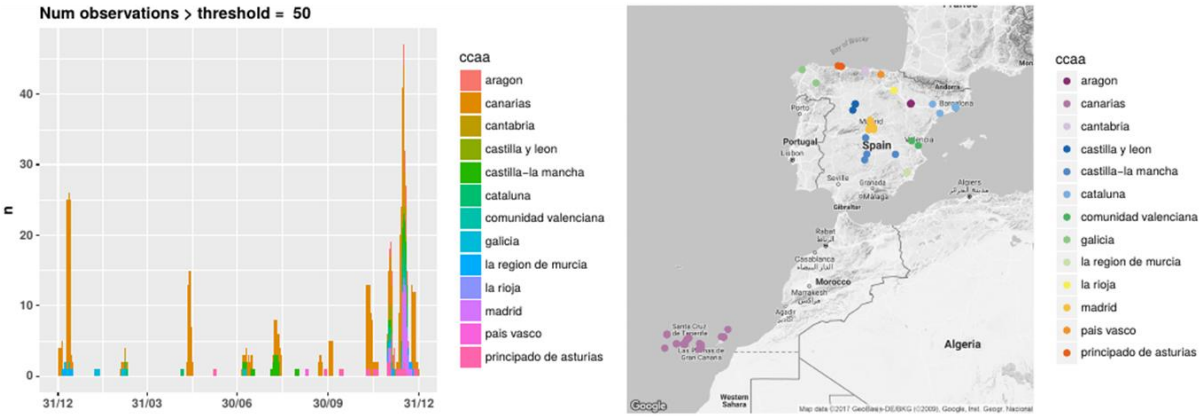


Figura 4: Izquierda, número de excedencias (n) del umbral 50 µg/m^3 para las concentraciones horarias de PM10 observadas en la red española de EIONET, durante el año 2015. Derecha, localización de las estaciones con excedencias. Los colores indican las comunidades autónomas con excedencias.

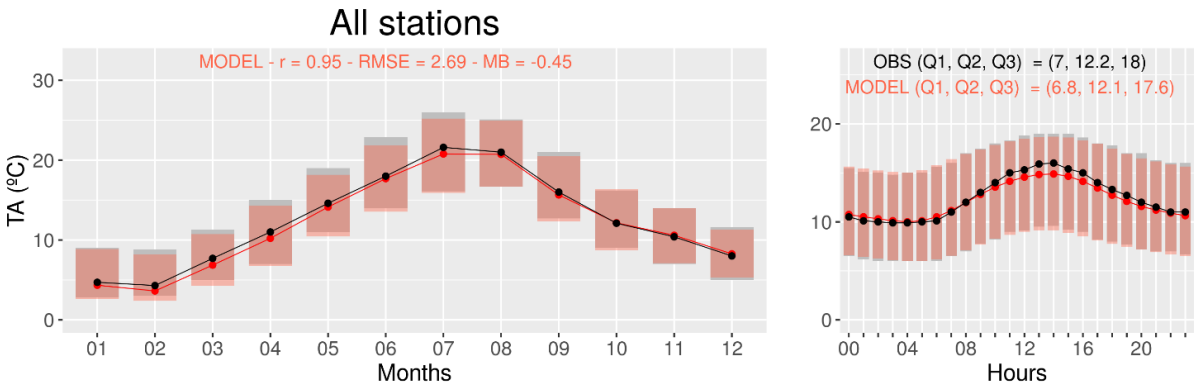


Figura 5: Serie temporal de temperatura (TA) simulada por CALIOPE (rojo) a 12 km de resolución sobre todas las estaciones METAR (negro) disponibles en 2015, para el promedio mensual (izquierda) y horario (derecha). RMSE indica el error cuadrático medio, MB es el sesgo promedio, y r el coeficiente de correlación. Q1, Q2, y Q3 son los cuartiles de las observaciones y el modelo.

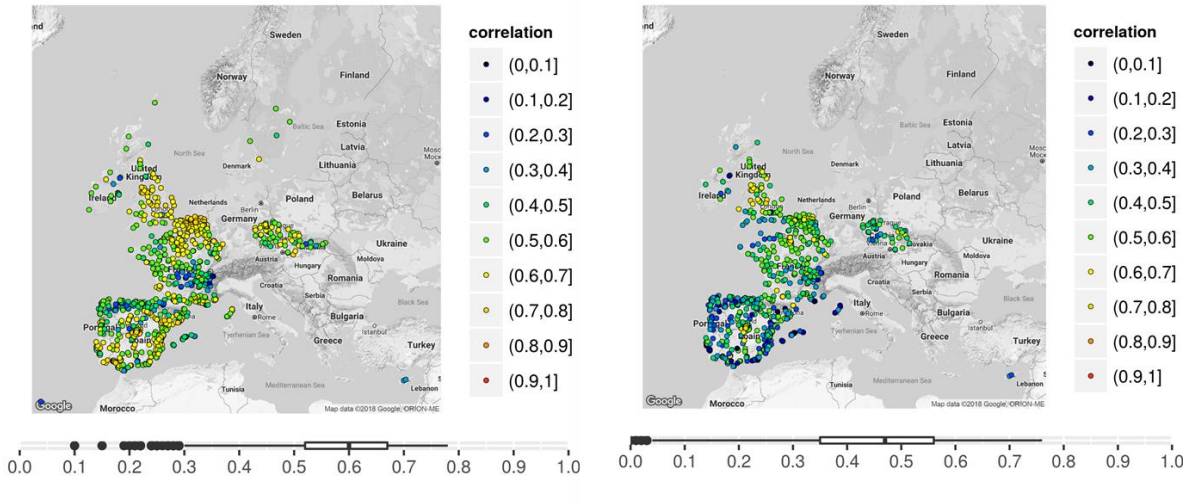
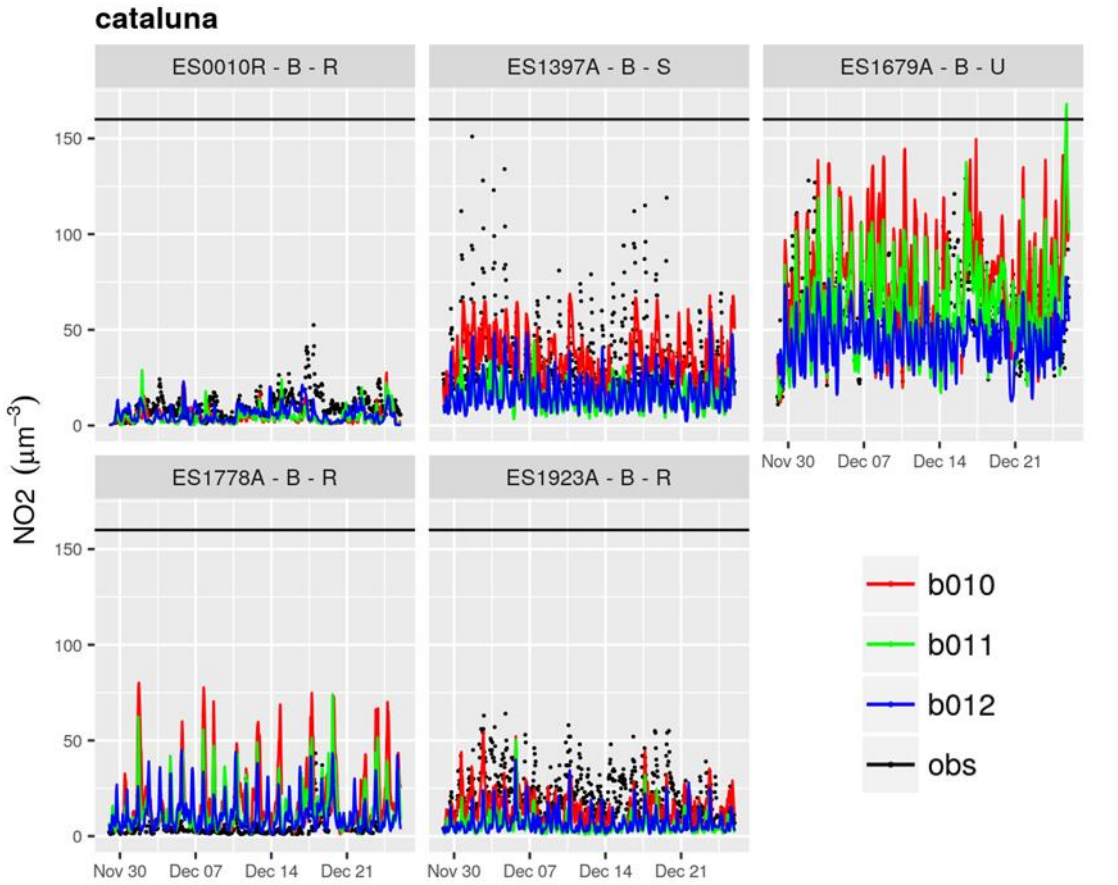
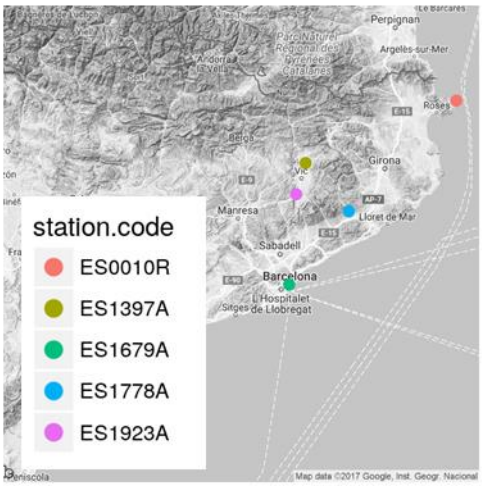


Figura 6: Distribución espacial del coeficiente de correlación entre las concentraciones modelizadas por CALIOPE a 12 km de resolución horizontal y las observadas en la red de EIONET para O_3 (izquierda) y NO_2 (derecha) en base horaria.





station.code	station.name	city
ES0010R	cabo de creus	cadaqués
ES1397A	e8-manlleu	manlleu
ES1679A	il-ciutadella	barcelona
ES1778A	montseny (la castanya)	montseny
ES1923A	tona - zona esportiva	tona

Figura 7: Series temporales del efecto de la resolución horizontal en las concentraciones de NO_2 en diferentes regiones de Cataluña: rural de fondo (B-R), suburbana de fondo (B-S) y urbana de fondo (B-U), durante el episodio de contaminación de NO_2 en diciembre del 2015. Se comparan tres experimentos: b010 CMAQ-HERMES-bottom-up a 1 km de resolución horizontal, b011 CMAQ-HERMES-bottom-up a 4 km de resolución horizontal y b012 CMAQ-HERMES-top-down a 12 km de resolución horizontal. Observaciones (obs) corresponden a la red EIONET.

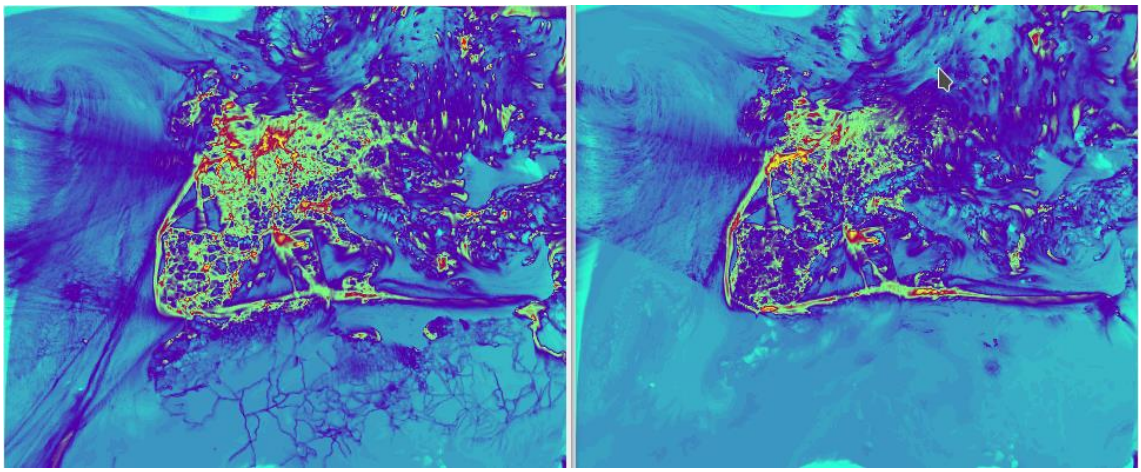


Figura 8: Concentraciones en superficie de NO_2 en el sistema auto-caliope con HERMESv3 (izquierda) y HERMESv2 (derecha)

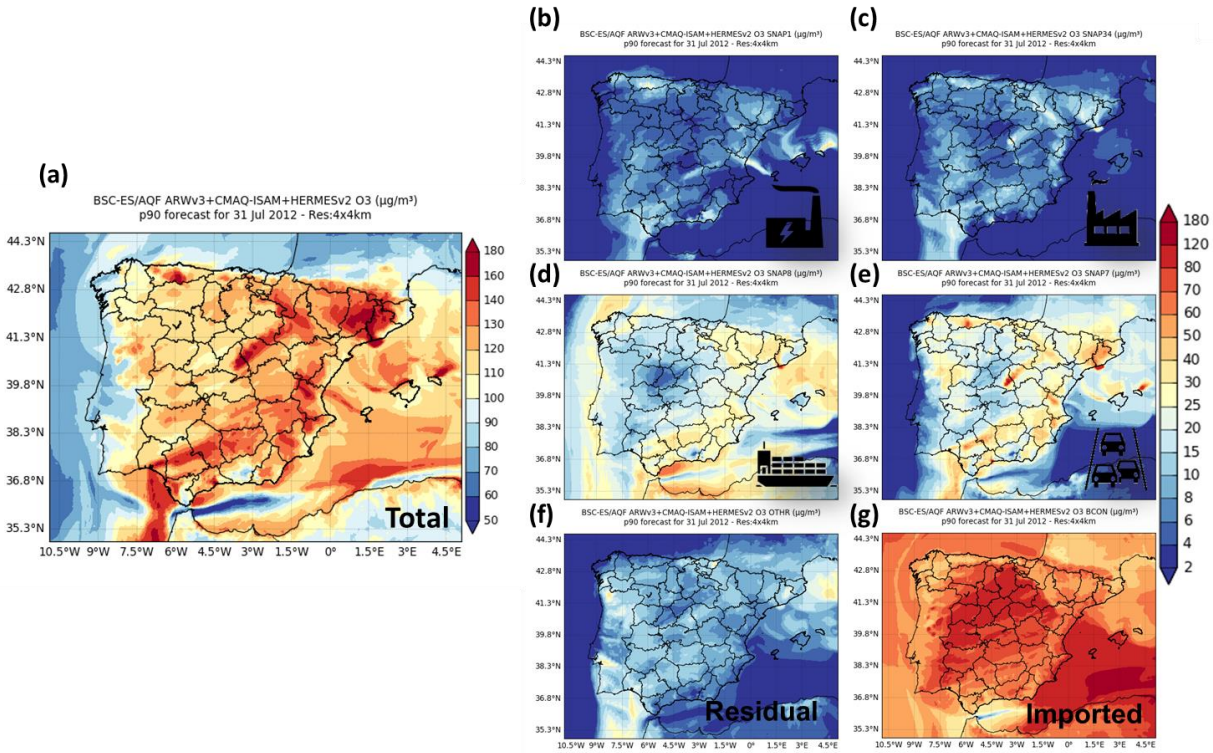


Figura 9: Concentraciones en superficie de O_3 en el sistema auto-caliope con contribución de fuentes por sectores socioeconómicos. (a) Concentración de O_3 total y contribución por sectores: generación de energía (b), procesos industriales (c), tráfico no rodado (d), tráfico rodado (e), otras fuentes residuales (f) y O_3 importado (g).

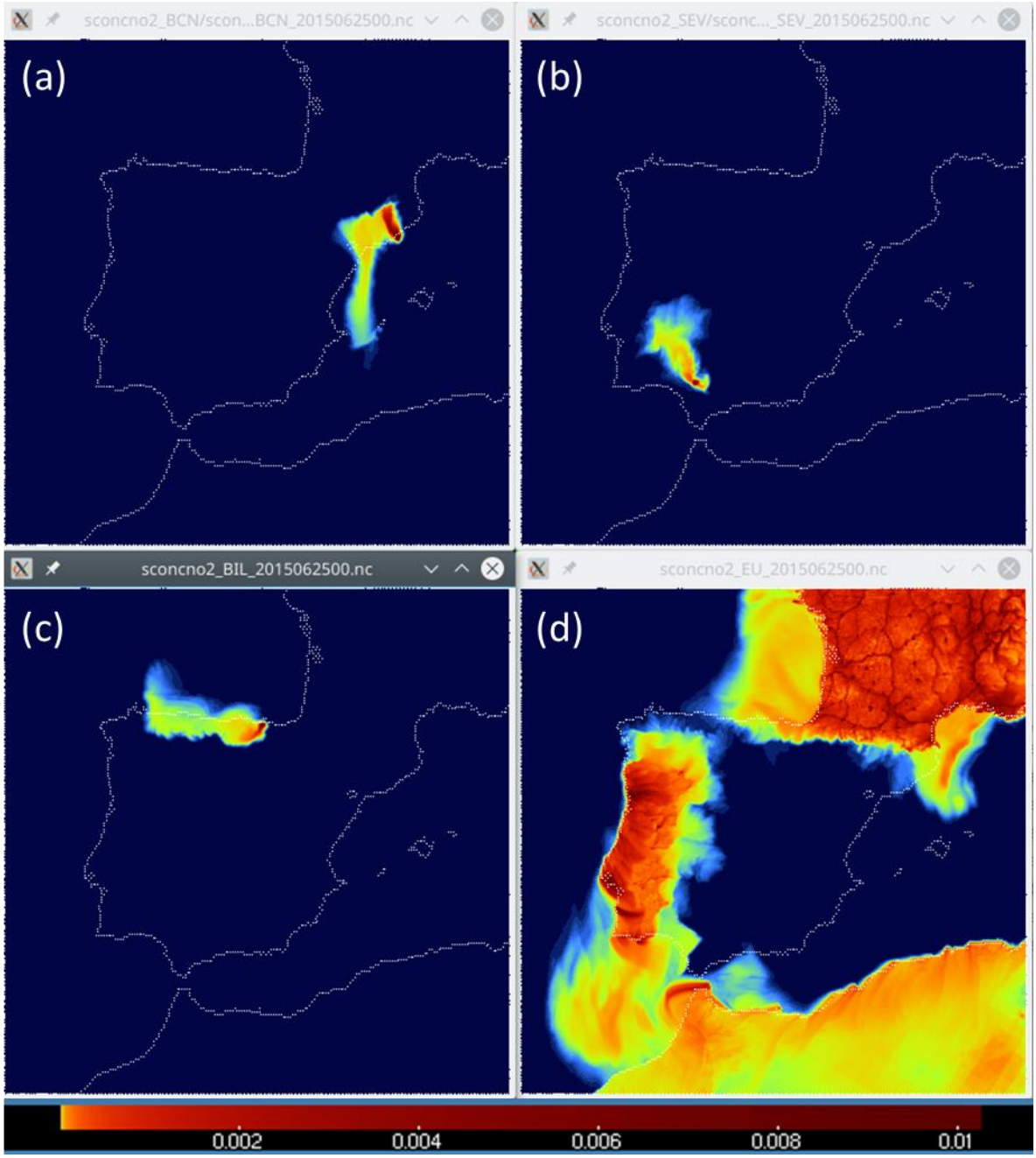


Figura 10: Contribución de NO_2 por regiones (en ppm) a las 19 GMT el día 25/06/2015 simulado con el sistema auto-caliope: (a) ciudad de Barcelona, (b) ciudad de Sevilla, (c) ciudad de Bilbao y (d) países vecinos de España.

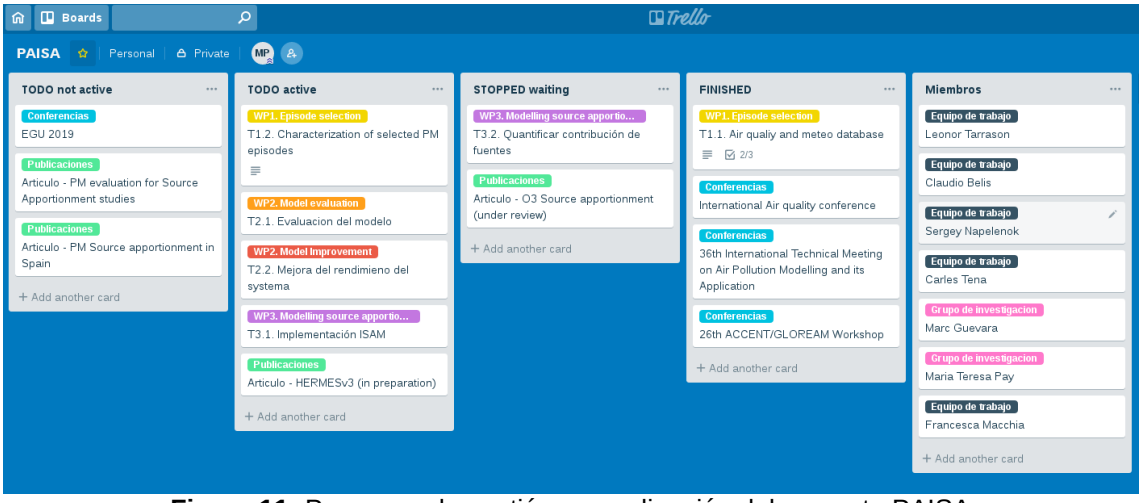


Figura 11: Programa de gestión y coordinación del proyecto PAISA

Instrucciones para la elaboración de los informes de seguimiento científico-técnico de proyectos Retos y Excelencia

Para el seguimiento científico-técnico de las convocatorias de Proyectos de I+D Excelencia, y Proyectos de I +D+i Retos, deberá presentarse:

- Cuando los proyectos tengan una duración plurianual, un **informe de seguimiento científico-técnico de progreso intermedio** cuando se cumpla la mitad del período de ejecución del proyecto.
- Tanto en los proyectos de duración anual como en los plurianuales, **un informe científico-técnico final**.

Los informes de justificación científico-técnica deberán contener la siguiente información:

- Desarrollo de las actividades realizadas hasta el momento, cumplimiento de objetivos propuestos en la actuación, así como el impacto de los resultados obtenidos evidenciados, entre otros, mediante la difusión de resultados en publicaciones, en revistas científicas, en libros, en presentaciones en congresos, en acciones de transferencia, en patentes, en internacionalización de las actividades, en colaboraciones con grupos nacionales e internacionales y, en su caso, en la formación de personal investigador.

- Cualquier cambio respecto a los gastos contemplados en el presupuesto incluido en la solicitud inicial del proyecto, justificando adecuadamente su necesidad para la consecución de los objetivos científico-técnicos del proyecto subvencionado.

- Cualquier modificación en la composición y/o dedicación del equipo de investigación. Estos cambios deben haber sido autorizados previamente por la Agencia Estatal de Investigación.

- Cualquier modificación en la composición del equipo de trabajo respecto al inicialmente previsto en la memoria científico-técnica del proyecto. Estos cambios no necesitan autorización previa por parte de la Agencia Estatal de Investigación.

- Cualquier modificación que se haya producido en los objetivos propuestos en la solicitud de la ayuda, detallando justificadamente los motivos que han llevado a ello.

En el caso de proyectos coordinados, se deberá presentar **un informe** por cada subproyecto.

Elaboración del Informe intermedio científico-técnico

Apartado A. Se debe indicar los datos actuales del proyecto. Si ha habido alguna modificación en los datos iniciales del proyecto debe indicarlo en el Apartado **A2.** Los proyectos que estén dirigidos por dos investigadores principales deberán rellenar también la casilla correspondiente al Investigador Principal 2.

Apartado B. Debe relacionar la situación de **todo** el personal que haya realizado actividades en el proyecto en el periodo que se justifica, tanto si forma parte del equipo de investigación como del equipo de trabajo.

Apartado C. Se reflejará el progreso de las actividades del proyecto y el cumplimiento de los objetivos propuestos, desarrollándolos en los siguientes apartados:

C1. Debe describir el grado de cumplimiento de los objetivos planteados en el proyecto.

C2. Debe describir las actividades científico-técnicas desarrolladas para alcanzar los objetivos planteados en el proyecto indicando los miembros del equipo que han participado en cada una de las actividades, remarcando las realizadas por el/los investigadores principales.

Se debe informar sobre el progreso y la consecución de todos los objetivos inicialmente planteados con el detalle suficiente para poder valorar el grado de cumplimiento, así como las actividades realizadas y los resultados alcanzados.

C3. Debe reflejar las dificultades o problemas que hayan podido surgir en el desarrollo del proyecto, así como su repercusión para el proyecto en su conjunto. Si se hubieran propuesto soluciones para superar dichas dificultades, también es necesario reflejarlas en este apartado.

Se entiende que estas situaciones son inherentes a la propia actividad científica, pero se debe informar y ayudar a valorar su alcance.

C4. y C5. Se deben relacionar en el apartado correspondiente las colaboraciones con otros grupos de investigación que tengan **relación directa** con el proyecto y las colaboraciones con empresas o sectores socioeconómicos.

Las actividades de colaboración deben detallarse y justificarse adecuadamente, especialmente cuando hayan implicado gasto o cuando no estuvieran contempladas en la solicitud original.

C6. Debe detallar las actividades de formación y movilidad del personal que participa en el proyecto.

C7. Debe describir las actividades de internacionalización y otras colaboraciones relacionadas con el proyecto.

Apartado D. Se reflejará la difusión de los resultados del proyecto.

D1. Deben relacionar **únicamente** las publicaciones derivadas directamente del presente proyecto, remarcando las realizadas por el/los investigadores principales. Así mismo, debe relacionar las patentes indicando si están licenciadas y/o en explotación.

D2. Debe relacionar la asistencia a congresos, conferencias o workshops relacionados con el proyecto con indicación del título de la ponencia, nombre del congreso/conferencia y de las personas del equipo que hayan asistido.

D3. Debe indicar las tesis doctorales relacionadas directamente con el proyecto

D4. Debe indicar otras publicaciones relacionadas con la temática del proyecto o fruto de colaboraciones **durante la ejecución del proyecto y que pudieran ser relevantes para el desarrollo del mismo**.

Apartado E. Se detallarán los gastos realizados hasta la mitad del periodo de ejecución del proyecto.

Se pretende poder relacionar el gasto realizado en el proyecto con el presupuesto solicitado inicialmente y valorar su adecuación a los objetivos y actividades realizados en el proyecto. En el caso de que el gasto no estuviera previsto inicialmente, deberán justificarse detalladamente las razones de dicho gasto.

En cada uno de sus apartados: **E1.** Personal, **E2.** Material inventariable, **E3**. Material fungible, **E4.** Viajes y dietas; y **E5**. Otros gastos, se deben mencionar los principales gastos realizados agrupados por tipo de gasto. Se trata de conocer los principales conceptos de gasto, **no** el desglose de todas las facturas del proyecto.

En el apartado **E6.** Gastos no contemplados en la solicitud original, es **importante** que se detalle las necesidades de su adquisición en el desarrollo del proyecto.

En el apartado **E7.** Indique el importe total ejecutado durante este periodo.