

Universidad Nacional de Cuyo
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

**DESARROLLO DE UNA HERRAMIENTA DE
REDIMENSIONAMIENTO ESPACIAL Y TEMPORAL DE
EMISIONES NATURALES Y ANTROPOGÉNICAS**

Juan Franco Schiavone

Director: Dr. Rafael Pedro Fernandez

*Informe del Seminario de Investigación de la
Licenciatura en Ciencias Básicas con Orientación en Física*

Mendoza, Marzo de 2018

ÍNDICE

1. RESUMEN	3
2. INTRODUCCIÓN.....	4
i. MODELADO DE LA ATMÓSFERA: METEOROLOGÍA, QUÍMICA ATMOSFÉRICA E INVENTARIOS DE EMISIÓN	4
ii. MOTIVACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN	7
iii. DESCRIPCIÓN DEL MODELO QUÍMICO/METEOROLÓGICO WRF-CHEM.....	8
iv. REQUERIMIENTOS TÉCNICOS DE WRF-CHEM, LENGUAJES DE PROGRAMACIÓN Y SCRIPTING	11
v. DESCRIPCIÓN DE LOS INVENTARIOS DE EMISIÓN UTILIZADOS	12
3. METODOLOGÍAS DE REDIMENSIONAMIENTO UTILIZADAS.....	22
i. REDIMENSIONAMIENTO ESPACIAL DE INVENTARIOS DE EMISIÓN.....	23
a. EMISIONES NATURALES	26
b. EMISIONES ANTROPOGÉNICAS	28
ii. REDIMENSIONAMIENTO TEMPORAL DE INVENTARIOS DE EMISIÓN.....	31
a. EMISIONES NATURALES	33
b. EMISIONES ANTROPOGÉNICAS	39
4. RESULTADOS.....	43
i. REESTRUCTURACIÓN DE INVENTARIOS DE EMISIONES NATURALES	43
a. REDIMENSIONAMIENTO ESPACIAL	43
b. REDIMENSIONAMIENTO TEMPORAL	45
ii. REESTRUCTURACIÓN DE INVENTARIOS DE EMISIONES ANTROPOGÉNICAS.....	50
a. REDIMENSIONAMIENTO ESPACIAL	50
b. REDIMENSIONAMIENTO TEMPORAL	61
5. CONCLUSIONES.....	63
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	66

1. RESUMEN

Los procesos atmosféricos físicos, químicos y biológicos, así como su interacción, pueden simularse con diferentes grados de complejidad utilizando modelos de transporte químicos globales (ej. CAM-Chem) y regionales (ej. WRF-Chem). El modelado computacional de éstos procesos es una tarea altamente compleja, que depende fuertemente de la calidad de las bases de datos y condiciones de contorno utilizadas para realizar las simulaciones. Este trabajo presenta el desarrollo de una herramienta de redimensionamiento espacial y temporal de emisiones naturales y antropogénicas orientada a adaptar diversos tipos de inventarios de emisión a los requisitos técnicos del modelo regional WRF-Chem. Dicha herramienta, permite reestructurar espacialmente cualquier inventario de emisión, ya sea local (resolución espacial entre 0,5 km y 5 km) o global (resolución espacial entre 50 km y 250 km) a un dominio WRF-Chem previamente definido por el usuario (incluyendo dominios anidados con resolución espacial entre 5 km y 50 km). Además, la herramienta brinda la posibilidad de modificar el perfil temporal de los inventarios de emisión para fuentes naturales y antropogénicas al introducir una variación horaria de flujo superficial, considerando campos políticos y geofísicos de la tierra y el océano sobre mapas de alta resolución. Como parte de la Tesina final de grado se realizó la adaptación de dos inventarios globales, uno de emisiones oceánicas naturales (CAM-Chem) y otro de emisiones antropogénicas vehiculares (EDGAR), en un dominio regional anidado sobre América del Sur (con resolución espacial de 36x36, 12x12 y 4x4 km²). Junto con ello, se llevó a cabo una comparación de los resultados obtenidos para la base de datos global EDGAR v4.2 (0,1°x0,1°), respecto de un inventario local de emisiones vehiculares de gases de efecto invernadero para Argentina desarrollado por GEAA (2,5x2,5 km²). Se evaluaron diferentes perfiles diurnos de fuentes naturales y antropogénicas, orientados a obtener una representación más realista del comportamiento de las fuentes de emisión respecto a los utilizados usualmente en los modelos de calidad de aire.

Palabras clave: WRF-Chem, CAM-Chem, EDGAR, GEAA, inventarios de emisión, redimensionamiento.

2. INTRODUCCIÓN

i. MODELADO DE LA ATMÓSFERA: METEOROLOGÍA, QUÍMICA ATMOSFÉRICA E INVENTARIOS DE EMISIÓN

La gran mayoría de los fenómenos atmosféricos conocidos se manifiestan por la interrelación de una inmensa cantidad de variables físicas y químicas que, en mayor o menor medida, están interconectadas y sus variaciones explican lo observado empíricamente. No podría estudiarse correctamente ningún fenómeno atmosférico aislándolo de todo lo que pasa a su alrededor, y es justamente éste grado de relación entre los distintos factores (físicos, químicos, biológicos, termodinámicos, etc.) lo que dificulta su estudio. Si bien es de gran utilidad el análisis individual de los factores atmosféricos conocidos, la capacidad de cálculo necesaria para acoplar de manera correcta las variables estudiadas por las diferentes disciplinas es inmensa. Además, la toma experimental de datos no siempre es viable, tanto por la cantidad de muestras necesarias para realizar una estadística confiable como por los costos que eso implicaría. Sin embargo, si se conocen los fundamentos físicos, químicos, biológicos y su interrelación, es posible realizar predicciones del estado de la atmósfera, para diferentes contextos a corto, mediano y largo plazo. Este pronóstico del comportamiento atmosférico, incluyendo los cambios en su composición química y reactividad, tiene enormes ventajas políticas, sociales y económicas, además de su invaluable importancia en el avance del conocimiento científico. Es por estas razones, entre otras, que la utilización de modelos computacionales que simulen las condiciones atmosféricas se ha vuelto indispensable para el estudio de la meteorología y todas sus ramas específicas.

En particular, el modelado computacional de la química atmosférica es un problema altamente complejo, que precisa de la representación conjunta de fenómenos meteorológicos (velocidad y dirección del viento, turbulencia, intercambios de calor, radiación, generación de aerosoles, etc.) y procesos químicos (emisión, deposición seca y húmeda, transporte, fotoquímica, química heterogénea, etc.)(Jacobson, 2005). Una descripción de los principales procesos físicos y químicos implementados en los modelos se muestra en la Figura 1.

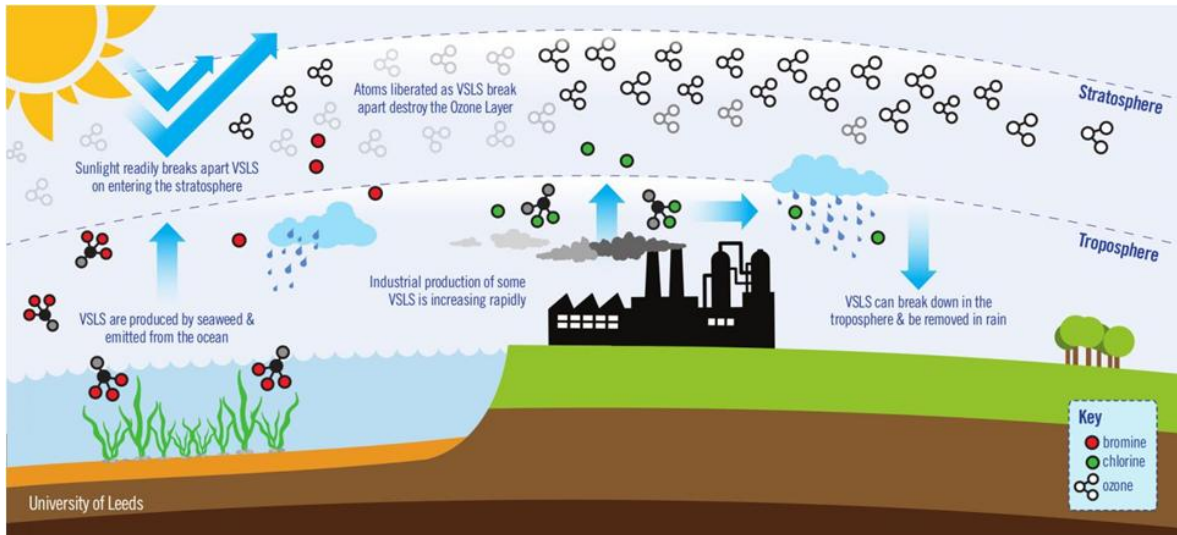


Figura 1. Representación de los procesos físicos y químicos en la atmósfera. (Very Short-Lived Substances in the Atmosphere | EurekAlert! Science News)

En los últimos años se han desarrollado complejos modelos regionales y globales que incluyen la interacción entre la química y la meteorología con distintos grados de complejidad. A escala global, uno de los modelos de Química-Clima más utilizados es **CAM-Chem** (*Community Atmospheric Model with Chemistry*), el cual ha sido desarrollado cooperativamente por la comunidad científica internacional (Lamarque *et al.*, 2012; Tilmes and Lamarque, 2015) y se encuentra mantenido por la división de química atmosférica del NCAR (*National Center for Atmospheric Research, USA*). Sus aplicaciones se extienden desde el estudio del estado pasado, presente y futuro de la atmósfera (Saiz-Lopez *et al.*, 2012; Tilmes and Lamarque, 2015; Fernandez *et al.*, 2017) hasta la representación 3-D de los procesos físicos y reacciones químicas que determinan la capacidad oxidativa y la transferencia radiativa de la tropósfera (Fernandez, Salawitch, *et al.*, 2014; Saiz-Lopez *et al.*, 2014). Las distribuciones químicas y campos meteorológicos generados con CAM-Chem (ej. concentración de ozono, perfiles de temperatura, etc.) pueden ser utilizadas como condiciones iniciales y de contorno (*background*) en los modelos regionales de mayor resolución espacial y temporal (Fernandez *et al.*, 2010).

La configuración estándar de CAM-Chem utiliza una resolución horizontal de 1,9° (latitud) × 2,5° (longitud) y 26 niveles verticales híbridos desde la superficie hasta aproximadamente unos 40 km de altitud (Lamarque *et al.*, 2012; Fernandez, Salawitch, *et al.*, 2014). Este modelo utiliza como base el mecanismo químico MOZART (*Model for Ozone And Related chemical*

Tracers)(Emmons *et al.*, 2010) el cual posee múltiples opciones de complejidad para la química troposférica y estratosférica. MOZART fue concebido como un modelo global tridimensional de transporte químico (Emmons *et al.*, 2010), desarrollado de manera cooperativa por el NCAR, el Instituto Max-Planck de Meteorología (Alemania) y la NOAA (*National Oceanographic and Atmospheric Administration, USA*). Este modelo es adecuado para estudios de química troposférica, aunque su mantenimiento se encuentra discontinuado y está siendo reemplazado por CAM-Chem.

A escala regional, existen modelos como **WRF-Chem** (*Weather Research and Forecasting model with Chemistry*)(Grell *et al.*, 2005; Peckham *et al.*, 2010) que permiten modelar con mayor detalle el acoplamiento entre la química y la meteorología gracias al incremento en la resolución espacial utilizada. El correcto funcionamiento de los modelos atmosféricos regionales tales como WRF-Chem es altamente dependiente de la calidad y resolución espacio-temporal de las condiciones iniciales y de contorno, y de las bases de datos estáticas y dinámicas que se utilicen (Puliafito, 2010). En particular, la confección de inventarios de emisión adaptables a distintas áreas de estudio en diferentes regiones del planeta es una de las principales dificultades existentes, sobre todo cuando la complejidad de los eventos estudiados requiere de un análisis multi-escala que involucre el uso tanto de modelos globales como regionales (Fernandez *et al.*, 2010). El desarrollo y mantenimiento del código WRF-Chem es llevado a cabo por la GSD (*Global Systems Division*) del NOAA-ESRL (*NOAA Earth System Research Laboratory*) en estrecha colaboración con otros grupos de investigación e institutos de todo el mundo (*WRF-Chem Development and Support Team*).

La configuración por defecto del modelo WRF-Chem utiliza inventarios globales de emisión equivalentes a los incluidos en CAM-Chem (con escasa resolución y cobertura global), los cuales poseen una representación razonablemente buena para Europa y Estados Unidos, pero que no siempre han sido validadas para otras regiones (Andrade *et al.*, 2015). Entre estos, el inventario de emisión de gases contaminantes y de efecto invernadero de la base EDGAR (*Emission Database for Global Atmospheric Research*) incluye datos para Argentina y Sudamérica con una resolución aproximada de 100 km x 100 km (EDGAR v3) y 10 km x 10 km (EDGAR v4.2) (*EDGAR Web Page*). Si bien EDGAR v4.2 posee una alta resolución, la última versión de WRF-Chem existente en el repositorio de NOAA incluye por defecto la versión EDGAR v3. Es por ello que, dada su escasa resolución espacial y temporal, su utilización en el modelado de episodios de contaminación

puntuales se ve limitada (Peckham *et al.*, 2010). Además, muchos trabajos internacionales que utilizan la base de datos de EDGAR no pueden reproducir la variación temporal de las medidas de calidad de aire en las grandes ciudades, ya que dicho inventario considera emisiones vehiculares constantes en el tiempo (Georgiou *et al.*, 2018). Recientemente se ha determinado que la representación espacial incluida en dicho inventario global difiere enormemente respecto a las obtenidas utilizando herramientas GIS (*Geographic Information System*) de los diferentes mapas cartográficos desarrollados para Sudamérica (Puliafito, Allende and Castesana, 2017).

ii. MOTIVACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN

Una correcta descripción de la calidad de aire y procesos de interacción química-física en los modelos regionales sólo es posible si se utilizan inventarios de emisión con elevada resolución espacial y temporal. Basados en esta hipótesis, se espera que el aumento en la resolución espacial de los mapas de emisión permita describir de manera adecuada los procesos atmosféricos, para emisiones generadas tanto de manera natural como antropogénica. A su vez, la implementación de perfiles temporales permite profundizar el análisis del comportamiento atmosférico y la interacción química-meteorología. Actualmente, la mayoría de los inventarios de emisión disponibles poseen datos con variabilidad mensual o anual, lo que impide realizar análisis exhaustivos respecto al comportamiento real de los procesos atmosféricos, así como validar las simulaciones con las medidas existentes. Por ejemplo, ciertas especies emitidas naturalmente a la atmósfera dependen de la radiación solar incidente, por lo que claramente es importante considerar no solo la variabilidad horaria, sino además la estacionalidad o variabilidad anual sobre cada zona del dominio estudiado, que permita conocer la cantidad de horas de luz solar diaria sobre cada zona en las diferentes épocas del año. Así mismo, al estudiar emisiones generadas por el hombre, es crucial conocer con el mayor detalle posible la distribución geográfica de las ciudades, el comportamiento socio-económico de la población y los horarios de mayor producción de las distintas fuentes de emisión (Puliafito, 2010; Fernandez, Cremades, *et al.*, 2014).

Uno de los mayores problemas que debe afrontarse a la hora de trabajar con los modelos computacionales es la incorrecta representación espacial que generalmente presentan los inventarios globales para Sudamérica (Andrade *et al.*, 2015; Andrade-Flores *et al.*, 2016). Ésta

deficiencia se ve reflejada no sólo en la baja resolución espacial que presentan las bases de datos, sino también en valores incorrectos de emisión en ciertas regiones, ya sea por exceso o por defecto. Afortunadamente, existen inventarios locales para ciertas zonas y especies que pueden acoplarse a los inventarios globales a fin de superar dichas limitaciones, al menos para Argentina (Mulena *et al.*, 2016; Puliafito, Allende and Castesana, 2017)

Es por ello que la presente Tesina se plantea con la finalidad de implementar inventarios de emisiones naturales y antropogénicas en los modelos WRF-Chem y CAM-Chem, tendientes a realizar estudios de calidad de aire y fisicoquímica atmosférica a escala local, regional y global. Para ello, resulta necesario adaptar los inventarios locales y regionales existentes para Sudamérica y Argentina a los formatos estándares de los inventarios globales, y a los requerimientos técnicos de WRF-Chem, a fin de mejorar la resolución espacial y la evolución temporal de las fuentes de emisión.

Ante este objetivo se muestra imperiosa la necesidad de desarrollar distintas herramientas computacionales que permitan reestructurar y redimensionar las bases de datos e inventarios de emisión existentes a los requerimientos de los modelos WRF-Chem y CAM-Chem. Dichas herramientas, si bien desarrolladas y aplicadas para unas pocas especies de algunos inventarios para Argentina, pueden ser utilizadas en el estudio de otras especies y otros inventarios disponibles para Sudamérica, e incluso a nivel global.

iii. DESCRIPCIÓN DEL MODELO QUÍMICO/METEOROLÓGICO WRF-CHEM

WRF-Chem es la componente química acoplada al modelo meteorológico WRF (*Weather Research and Forecasting*), el cual ha sido desarrollado en colaboración entre varias agencias entre las que se destacan NOAA, NCAR Y NCEP (*National Centers for Environmental Prediction*) (Michalakes and M. McAtee, 2002). El modelo WRF resuelve en una escala regional las ecuaciones dinámicas primitivas de un fluido estacionario (la atmósfera), considerando la conservación de los flujos escalares y de masa a partir de condiciones iniciales y de contorno obtenidas de modelos de circulación global. Para ello cuenta con diversas estructuras dinámicas y numerosas parametrizaciones físicas que permiten representar distintos procesos, y cuya aplicación es

provechosa a diferentes escalas que van desde las decenas de metros hasta los cientos de kilómetros.

WRF-Chem es actualmente el modelo de transporte químico de escala regional por excelencia utilizado por la comunidad científica internacional (Grell *et al.*, 2005; Peckham *et al.*, 2010). Dependiendo de cómo se lo configure, WRF-Chem puede tomar las condiciones químicas iniciales y de contorno de modelos globales como CAM-Chem (Grell *et al.*, 2005) y/o MOZART (Emmons *et al.*, 2010). WRF-Chem ha sido utilizado para realizar estudios en un amplio abanico de dominios espaciales, que abarcan desde el transporte reactivo de contaminantes a nivel continental (escala sinóptica), hasta la descripción de la evolución horaria de la pluma de contaminantes de una ciudad y su dependencia con los vientos locales (Jiang *et al.*, 2008; Zhang and Wen, 2010; Im *et al.*, 2015). Su aplicación en distintos campos permite explicar episodios pasados, evaluar los potenciales efectos de las diferentes estrategias de reducción de emisiones o realizar pronósticos de la calidad del aire, considerando la interacción entre la química y la meteorología de alta resolución (Fernandez *et al.*, 2010).

Recientemente, el modelo WRF-Chem ha sido utilizado para determinar concentraciones de ozono en regiones topográficamente complejas (Schürmann *et al.*, 2009), obtener la variación temporal y espacial de contaminantes en megaciudades (Ying, Tie and Li, 2009), evaluar el impacto regional de ozono transfronterizo en la calidad de aire sub-urbano (Lee, Sung and Lee, 2008), entre otros. A su vez, en ciertas regiones de Sudamérica ha sido utilizado últimamente, como en el estudio de episodios de contaminación urbana en Santiago de Chile (Saide *et al.*, 2011), la variación estacional de la emisión de CO₂ a la atmósfera en el Amazonas (Andreae *et al.*, 2012), etc.

El IGAC-AWG (*International Global Atmospheric Chemistry Project Americas Working Group*), utiliza el modelo WRF-Chem para estudiar la contaminación del aire en América Latina y el Caribe, considerando sus zonas urbanas de alta densidad poblacional y las vastas zonas rurales despobladas. En estas regiones el aumento de las fuentes móviles e industriales y el crecimiento de las actividades agrícolas relacionadas con la quema de biomasa han degradado la calidad del aire, además de contribuir al derretimiento de glaciares andinos (Andrade-Flores *et al.*, 2016).

El modelo WRF-Chem cuenta con dos núcleos dinámicos, un sistema de asimilación de datos y una arquitectura de software que soporta computación paralela y extensibilidad del sistema. Puede observarse la representación modular de WRF en la Figura 2.

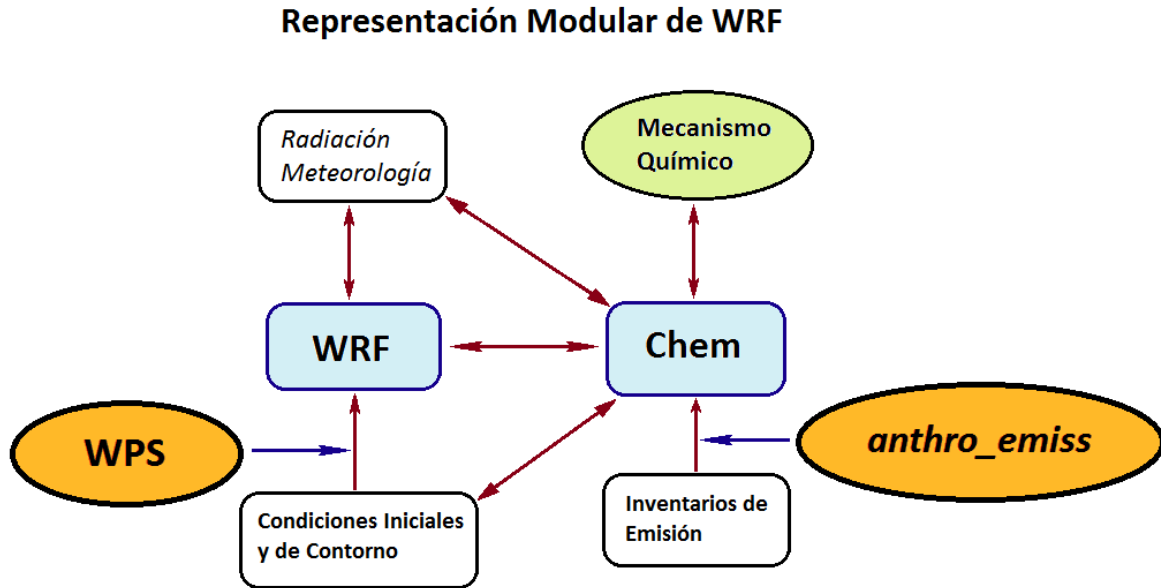


Figura 2. Representación modular de WRF

Normalmente el modelado de los procesos químicos en los sistemas de calidad de aire a escala regional se realiza independientemente del modelado meteorológico, esto es, realizando una integración de los mecanismos químicos sobre una grilla externa que contiene información sobre el transporte de masa y los campos meteorológicos, determinados con anterioridad (*esquema offline*). El desarrollo de WRF-Chem ha permitido realizar la modelación acoplada de la química y la meteorología dentro de un único sistema de coordenadas horizontales y espaciales, en un esquema online (Grell *et al.*, 2005; Jiang *et al.*, 2008; Wang *et al.*, 2009). Esto permite configurar una amplia gama de parametrizaciones químicas y físicas sin necesidad de interpolarlas en dominios espacio-temporales diferentes.

iv. REQUERIMIENTOS TÉCNICOS DE WRF-CHEM, LENGUAJES DE PROGRAMACIÓN Y SCRIPTING

El desarrollo de herramientas computacionales (códigos fuentes, scripts, rutinas, etc.) necesarias tanto para llevar a cabo las modificaciones dentro del código original como para constatar que dichos cambios fuesen los esperados, se realizó utilizando diferentes herramientas de programación. Dichas herramientas incluyeron el manejo de códigos de análisis y procesamiento en IDL y NCL, la utilización de paquetes de lectura y manipulación de archivos en formato Grib y NetCDF (ncview, NCO tools), así como el desarrollo y manejo de pequeños scripts de control en lenguaje bash o tcsh.

El lenguaje de programación utilizado para modificar el código original fue Fortran 90. Los scripts de control y de generación de resultados gráficos a partir de los archivos de texto obtenidos (Muller and Cruz, 2007) fueron creados y modificados con el editor de textos Kate, disponible para las distintas distribuciones de Linux.

Los archivos en formato Grib y netCDF utilizados son georeferenciados y poseen datos multidimensionales, por lo que herramientas de visualización (como ncview) fueron utilizadas para la interpretación de la estructura y el comportamiento de variables en particular.

El lenguaje de programación utilizado para este fin fue el NCAR Command Language, más conocido como NCL, el cual fue diseñado específicamente para el procesamiento y visualización de datos. Además de las características comunes de programación, NCL también tiene características que no se encuentran en otros lenguajes de programación, incluyendo la manipulación de metadatos, la configuración de las visualizaciones, la importación de datos de una variedad de formatos, y un álgebra que soporta operaciones entre arreglos (matriciales), y admite llamar a rutinas externas con formato C y Fortran (*CISL's NCAR Command Language (NCL) Web Page*, 2017).

v. DESCRIPCIÓN DE LOS INVENTARIOS DE EMISIÓN UTILIZADOS

Existe una amplia gama de bases de datos disponibles cuya variabilidad fundamental radica en la notoria diferencia entre sus resoluciones espaciales y temporales. Además, se puede hallar contrastes también en función de la metodología utilizada para generarlos, su estructura interna, las especies químicas consideradas, la cantidad de variables que presenta, etc. En el presente trabajo se hace foco en las bases de datos de CAM-Chem para emisiones oceánicas de CHBr_3 (bromoforno)(Ordóñez *et al.*, 2012), en la base de datos de EDGAR para emisiones vehiculares de CO_2 (EDGAR Web Page), y en la base de datos desarrollada por GEAA (Grupo de Estudios Atmosféricos y Ambientales - Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Mendoza) (Puliafito *et al.*, 2015; Puliafito, Allende and Castesana, 2017) también para emisiones vehiculares de CO_2 . Si bien se trabajó con las mencionadas especies y resoluciones para el desarrollo de la herramienta, la misma puede aplicarse a todas las especies y resoluciones disponibles para estos inventarios, así como para otros inventarios que presenten la misma estructura.

A continuación se presenta una breve descripción de las bases de datos mencionadas, resaltando la forma en que fue desarrollada cada una y las diferencias entre sus resoluciones espaciales y temporales.

BASE DE DATOS DE EMISIONES OCEÁNICAS DE CAM-CHEM

Las especies de VSLs (*Very Short-Lived substances*) bromados más abundantes son predominantemente de origen oceánico natural: bromoforno (CHBr_3), dibromometano (CH_2Br_2), bromoclorometano (CH_2BrCl), bromodichlorometano (CH_2BrCl_2), dibromoclorometano (CHBr_2Cl) (Saiz-Lopez *et al.*, 2012; Carpenter *et al.*, 2014). Las fuentes identificadas para estos compuestos incluyen macroalgas, algas de hielo y fitoplancton. Los estudios modelo han resaltado la importancia de los bromocarbonos para transportar bromo a la estratosfera (Salawitch *et al.*, 2010). Además de la destrucción fotoquímica de bromocarbonos, el reciclaje catalítico en aerosoles de sal marina también proporciona una fuente adicional de bromo a la atmósfera (Fernandez *et al.*, 2014).

Gran parte del trabajo desarrollado se centra en las emisiones oceánicas de VSLs, en particular de Bromoformo. Diversos estudios realizados tanto a bordo de cruceros marinos como en estaciones costeras meridionales sobre los océanos Atlántico y Pacífico han presentado informes de concentraciones atmosféricas de CHBr_3 y otros bromocarbonos. Los mismos revelaron concentraciones máximas de CHBr_3 y en menor medida de CH_2Br_2 y bromoclorometanos sobre el Atlántico Este en la zona Tropical (cerca de 10°N). Atlas et al. (1993) encontraron un máximo de CHBr_3 y CH_2Br_2 cerca del Ecuador, relacionado con el nivel máximo de clorofila observado durante un muestreo en el Océano Pacífico. Del mismo modo, las muestras de aire recogidas durante las misiones PEM-Tropics (*Pacific Exploratory Missions in the Tropics*) mostraron mayores proporciones de mezcla de CHBr_3 , CH_2Br_2 , CHBr_2Cl y CHBrCl_2 en los trópicos en relación con las latitudes medias (Schauffler et al., 1993). Estos resultados apuntan a importantes fuentes biogénicas marinas de estas especies en los trópicos. Una revisión sobre la contribución del bromoformo a la química atmosférica mostró que el intercambio mar-aire es la principal fuente de bromoformo atmosférico, que se produce en el agua superficial por algas altamente variables en el espacio y tiempo y por organismos planctónicos, mientras que las fuentes antropogénicas de bromoformo la cloración del agua constituye una contribución menor de la emisión global total (Quack and Wallace, 2003). Más recientemente, Carpenter et al. (2007) confirmaron una fuente generalizada y productiva de CHBr_3 en el sistema de surgencia costera del noroeste de África entre aproximadamente 10°N y 25°N , y notaron una fuente potencial muy fuerte de macroalgas tropicales. Se encontraron concentraciones elevadas de CHBr_3 y CH_2Br_2 en masas de aire y agua que contienen clorofila de esa región, particularmente para $16^\circ\text{-}20^\circ\text{N}$, $16^\circ\text{-}18^\circ\text{W}$ (Carpenter, Jones and Dunk, 2009).

En el inventario de Ordoñez et al. (2012), las emisiones oceánicas de bromocarbonos y yodocarbonos de VSL han sido parametrizadas mediante una fuente biogénica dependiente de clorofila en los océanos tropicales ($20^\circ\text{N}\text{-}20^\circ\text{S}$). Flujos oceánicos constantes se imponen por separado en cuatro bandas latitudinales diferentes en los extratropicos ($20^\circ - 50^\circ$ y superiores a 50° en ambos hemisferios), como puede verse en la **Figura 3**. Dada la mayor productividad biológica en las plataformas marinas respecto del océano profundo, el inventario impone un factor de emisión en la costa de 2,5 veces el valor de emisión en el océano, el cual se obtiene a partir de una aproximación relacionada con la mayor cantidad de nutrientes normalmente disponible en estas zonas costeras.

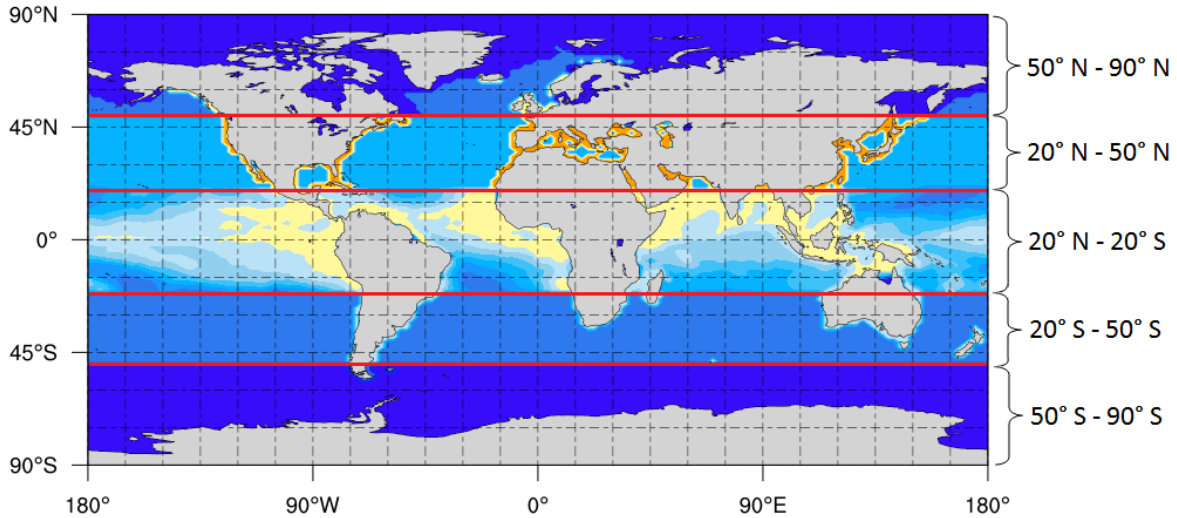


Figura 3. Distribución latitudinal de CHBr_3 en la base de datos de CAM-Chem (Ordoñez et al., 2012).

La cuantificación de las emisiones de bromocarbonos se realizó utilizando datos y factores de emisión globales con baja resolución espacial y temporal, los cuales permiten obtener la emisión anual total, a fin de refinar su resolución mediante la incorporación de información adicional (enfoque de tipo *Top-down*, **Figura 4**).

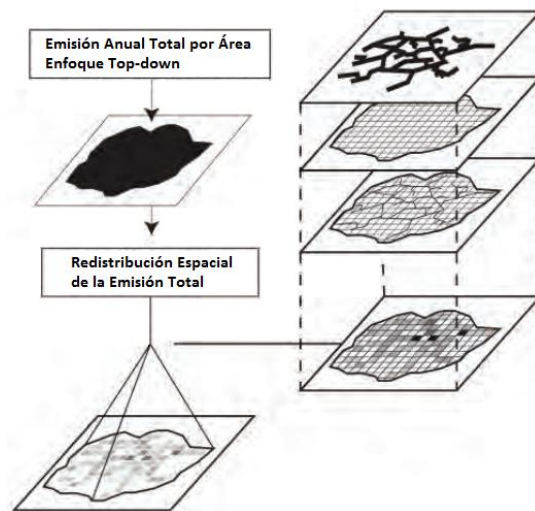


Figura 4. Esquema representativo del enfoque Top-down (adaptación de Puliafito et al., 2011).

La implementación de fuentes oceánicas naturales de halocarbonos en CAM-Chem, se basa en informes previos sobre:

- i. Niveles mejorados de bromocarbonos en los trópicos

- ii. Fuentes biológicas conocidas de ambos bromocarbonos y yodocarbonos
- iii. Correlaciones encontradas entre ciertas especies
- iv. Mejora en la resolución espacial de emisiones en zonas costeras

El inventario de CAM-Chem desarrollado por Ordoñez et al. (2012) está basado en la correlación de la producción de bromoformo con las áreas biológicamente activas en las regiones tropicales utilizando una climatología mensual de clorofila proporcionada por el proyecto SeaWIFS para 1998-2003. Estos datos satelitales muestran un fuerte aumento de la concentración en las regiones costeras de afloramiento tropical que está relacionado con el transporte eficiente de nutrientes a las aguas superficiales y, en consecuencia, con una alta producción primaria. La emisión de bromoformo y otros halocarburos VSL es conducida por fotosíntesis y depende del flujo actínico, con una variación diurna descrita por un perfil gaussiano que alcanza su punto máximo al mediodía y es nulo por la noche (ver Capítulo 3). En su configuración inicial, el 70% del flujo total de CHBr_3 es emitido en los trópicos (20°S - 20°N) siguiendo el campo de clorofila, mientras que las emisiones no dependientes de clorofila contribuyen al 25% en las latitudes medias (20° - 50°), y el 5% restante en latitudes altas (por encima de 50°). Esta disposición puede resumirse en la siguiente fórmula (Ordóñez *et al.*, 2012):

$$E = k \cdot f \cdot r \cdot chl_a$$

donde:

- E = flujo de emisión de una especie determinada en moléculas $\cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, con un factor de conversión constante $k = 1,127 \times 10^5$.
- f = factor dependiente de la especie, igual a 2 para CHBr_3 ; 0,50 para CH_2Br_2 ; 0,08 para CH_2BrCl ; 0,12 para CHBr_2Cl y 0,10 para CHBrCl_2 .
- r = factor igual a 2,5 para las zonas costeras fuera de los trópicos e igual a 1 en cualquier otro lugar sobre los océanos globales y las costas tropicales.
- chl_a = valores de clorofila tipo a, a partir de una climatología mensual de SeaWIFS para el período 1998-2003 (Ordóñez *et al.*, 2012).

El inventario de Ordoñez ha sido utilizado para el estudio pasado, presente y futuro de la atmósfera a escala global tanto para el Bromo (Fernandez, Salawitch, *et al.*, 2014; Fernandez *et al.*, 2017) y Yodo (Gómez Martín *et al.*, 2013; Saiz-Lopez *et al.*, 2014).

Desde al año 2010 en adelante, los informes intergubernamentales del UNEP (*United Nations Environment Programme*) y la WMO (*World Meteorological Organization*) han incluido las fuentes oceánicas de VSL dentro de la lista de compuestos a monitorear de manera continua debido a que poseen un elevado potencial destructor de ozono.

BASE DE DATOS DE EDGAR

La base de datos de EDGAR proporciona las emisiones antropogénicas de gases de efecto invernadero y contaminantes atmosféricos para todo el planeta (*EDGAR Web Page*). Permite conocer los valores de dichas emisiones tanto en el pasado como en el presente, y a su vez distinguirlos por país con una variable resolución espacial. El desarrollo actual de EDGAR es un proyecto conjunto del JRC (*Joint Research Centre*) de la Comisión Europea y de la PBL (*Netherlands Environmental Assessment Agency*)(*EDGAR Web Page*).

Para el cálculo de emisiones, EDGAR utiliza factores que tienen en cuenta los diferentes compuestos emitidos, los sectores contaminantes (como por ejemplo transporte por carreteras, aviación doméstica e internacional, procesos industriales, producciones en refinerías, etc.), tecnologías de reducción en los diferentes países y emisiones no controladas, para cada año. La **Tabla 1** muestra una lista completa de los sectores y tecnologías incluidos en la base de datos de EDGAR (*EDGAR Web Page*).

Tabla 1. Sectores y Tecnologías incluidas en EDGAR (EDGAR Web Page).

Denominación	Sector	Sustancias Mapeadas
1A1+1A2	Transformación energética	CH ₄ , N ₂ O
1A1a	Industria energética	CO ₂
1A1c+2G	Transformación no energética	CO ₂
1A2	Combustión en el sector industrial	CO ₂
1A3a	Aviación nacional e internacional	CO ₂
1A3a+c+d+e	Transporte (no por carretera)	CH ₄ , N ₂ O
1A3b	Transporte por carretera	CH ₄ , CO ₂ , N ₂ O
1A3c+1A3e	Transporte terrestre (no por carretera)	CO ₂
1A3d	Transporte marítimo nacional e internacional	CO ₂
1A4	Energía para edificios	CH ₄ , CO ₂ , N ₂ O
1B1	Pérdidas de combustibles sólidos	CH ₄ , CO ₂
1B2a	Producción de petróleo y refinerías	CH ₄ , CO ₂ , N ₂ O
1B2b	Producción y distribución de gas	CH ₄
2	Procesos industriales y uso de productos	C ₂ F ₆ , C ₃ F ₈ , C ₄ F ₁₀ , C ₅ F ₁₂ , C ₆ F ₁₄ , ...
2A	Procesos minerales no metálicos	CO ₂
2B+3	Solventes para procesos químicos	CO ₂
2C	Procesos del metal	CO ₂
4A	Fermentación entérica	CH ₄
4B	Manejo de estiércol	CH ₄ , N ₂ O
4C+4D	Sustratos agrícolas	CH ₄ , CO ₂ , N ₂ O
4D3	Emissiones agrícolas indirectas de N ₂ O	N ₂ O
4F	Quema de residuos agrícolas	CH ₄ , N ₂ O
5A+C+D+F+4E	Quema de biomasa a gran escala	CO ₂
6	Residuos sólidos y aguas residuales	N ₂ O
6A+6C	Eliminación de residuos sólidos	CH ₄ , CO ₂
6B	Aguas residuales	CH ₄
7A	Quema de combustibles fósiles	CH ₄ , CO ₂ , N ₂ O
7B+7C	Emissiones indirectas de NO _x y NH ₃	N ₂ O

Las emisiones (EM) para un país C se calculan para cada compuesto x sobre una base anual (y) y el sector i con tecnología j que la genera, según:

$$EM_c(y, x) = \sum_{i,j,k} [AD_{C,i}(y) \cdot TECH_{C,i,j}(y) \cdot EOP_{C,i,j,k}(y) \cdot EF_{C,i,j}(y, x) \cdot (1 - RED_{C,i,j,k}(y, x))]$$

donde:

- $AD_{C,i}(y)$ = actividad específica del país, cuantificando la actividad humana para cada uno de los sectores i .
- $TECH_{C,i,j}(y)$ = combinación de las j diferentes tecnologías para cada sector i .
- $EOP_{C,i,j,k}(y)$ = porcentaje de reducción en una de las medidas k de final de proceso (end-of-pipe) para cada tecnología j .
- $EF_{C,i,j}(y, x)$ = factor de emisión específico por país para cada sector i y tecnología j .
- $RED_{C,i,j,k}(y, x)$ = reducción relativa de la emisión no controlada por la medida de reducción k instalada.

Las emisiones de gases de efecto invernadero y contaminantes atmosféricos se calculan para los gases de efecto invernadero directos (dióxido de carbono (CO_2), metano (CH_4), óxido nitroso (N_2O), hidrofluorocarbonos, etc), gases precursores de ozono (monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrógeno (NO_x), y compuestos orgánicos volátiles (VOCs)), gases acidificantes (amoníaco (NH_3), óxidos de nitrógeno y dióxido de azufre (SO_2)), partículas primarias, mercurio y sustancias agotadoras de capa de ozono estratosférico (clorofluorocarbonos, halones, hidroclorofluorocarbonos, tetracloruro de carbono, bromuro y metilcloroformo) ('World Meteorological Organization (WMO)', 2014; Seinfeld and Pandis, 2016).

EDGAR realizó la distribución geográfica utilizando conjuntos de datos que cuentan con la ubicación de las instalaciones de centrales, fábricas, redes de carreteras, rutas marítimas, densidad de población humana y animal, el uso agrícola de la tierra, y sus respectivas variaciones temporales (con variabilidad anual). Los conjuntos de datos de entrada para grillas de puntos, líneas y áreas en varias resoluciones han sido incluidos en una cuadrícula de $0,1^\circ \times 0,1^\circ$ (EDGAR v4.2). En sus comienzos, sólo existía una base de datos de EDGAR con resolución $1^\circ \times 1^\circ$ (EDGAR v3) la cual es la única base implementada operativamente en WRF-Chem por defecto. Durante el desarrollo de sus inventarios apareció una base con mejor resolución, pero que aún mostraba

deficiencias en la distribución espacial (Fernandez, Cremades, *et al.*, 2014). Si bien en la actualidad se encuentra disponible una base EDGAR con mejor resolución, el desarrollo del código de redimensionamiento sigue siendo ventajoso ya que permite hacer análisis y comparaciones de alta calidad entre bases de datos diferentes, con distintos criterios de desarrollo y variabilidad espacio/temporal. Además, la herramienta desarrollada permite reestructurar ambas bases.

Para disponer de series temporales anuales y mensuales, los valores de entrada de EDGAR fueron obtenidos a partir de estadísticas anuales internacionales, recogidas a partir de 1970 hasta la actualidad para el CO₂, con dos años de retraso para otros gases de efecto invernadero (contaminantes atmosféricos) o incluso 4 años de retraso para partículas de efecto invernadero (*EDGAR Web Page*).

BASE DE DATOS DE GEAA

Con el objeto de representar adecuadamente la calidad de aire y evaluar la posible evolución de partículas y aerosoles, el GEAA UTN-FRM ha preparado un inventario de emisiones para todo el territorio de la República Argentina, utilizando varias formas de contabilidad ambiental, tanto de tipo Top-down como Bottom-up (Puliafito, 2010). Se incorporaron al modelado fuentes industriales, residenciales, comerciales y agrícolas (Puliafito, Allende and Castesana, 2017). Debido al gran interés en entender y evaluar el impacto de las fuentes vehiculares, los desarrollos de GEAA consideran un modelo más complejo basado en factores de emisión, flujos y velocidades en los segmentos de calles (Castro et al., 2009).

Los cálculos de tipo Top-down suelen ser suficientes para estimar los promedios anuales, pero si se requiere información más detallada y una mejor resolución temporal, es necesario utilizar datos detallados de actividad y específicos de cada fuente de emisión para realizar las estimaciones (enfoque *Bottom-up*, **Figura 5**).

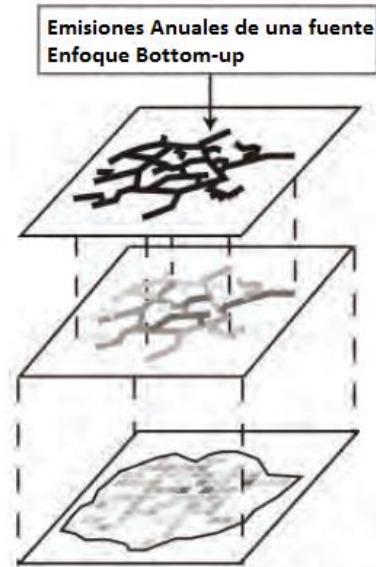


Figura 5. Esquema representativo del enfoque Bottom-up (adaptación de Puliafito et al., 2011)..

Este enfoque es especialmente necesario para las emisiones vehiculares, debido a su alta variabilidad espacial y temporal. Para caracterizar las emisiones vehiculares desde un enfoque Bottom-up, es necesario recopilar el conteo de tráfico en las intersecciones de las calles principales y calcular la velocidad promedio de conducción. En cada calle, los vehículos están agrupados en diferentes categorías de tipo, tamaño y gasto de combustible. Los factores utilizados se basan en la emisión promedio por distancia recorrida (en g/km). Las emisiones de contaminantes atmosféricos de fuentes vehiculares, para una determinada calle y para un período promedio (anual), se caracterizan por tres factores principales:

$$E = N \cdot F \cdot L$$

donde:

- E = emisión total en el tiempo considerado, en (g/unidad de tiempo).
- N = número de vehículos circulantes promedio en el período.
- F = factor específico contaminante de emisión promedio medido en g/km por vehículo.
- L = distancia media recorrida en km.

La emisión contaminante total $E(k)$ para cada contaminante k se calcula como:

$$E(k) = \sum_i L_i \cdot \left(\sum_m \frac{p_m}{100} \cdot F(m, k, v) \cdot N(m, i) \right)$$

donde:

- $F(m, k, v)$ = factor de emisión expresado como la masa de contaminante por unidad de longitud en función de la velocidad recorrida v , el tipo de vehículo m , y el contaminante k .
- $N(m, i)$ = flujo de tráfico expresado para cada segmento de la calle i y el tipo de vehículo m .

$p_m/100$ = proporción porcentual de cada tipo de vehículo (Puliafito, 2010).

3. METODOLOGÍAS DE REDIMENSIONAMIENTO UTILIZADAS

El desarrollo de la herramienta de redimensionamiento de inventarios de emisión se inició por la reestructuración espacial, con la intención de conocer los requerimientos de WRF-Chem, así como la dimensionalidad y dificultades técnicas que el mismo pudiera ofrecer. Específicamente, en una primera etapa se trató el redimensionamiento espacial de las bases de datos globales de CAM-Chem y EDGAR, para posteriormente poder acoplarlos con inventarios de emisiones (tanto naturales como antropogénicas) locales, con diferente resolución espacial.

El punto de partida para realizar el redimensionamiento espacial de diversos inventarios fue acoplar los inventarios globales utilizados en CAM-Chem (Ordóñez *et al.*, 2012) a los requerimientos del modelo WRF-Chem, pero sin modificar su resolución espacial. Esto permitió determinar la estructura y dimensionamiento de las distintas variables de contorno utilizadas en cada modelo. Luego, se avanzó en la reestructuración de los inventarios globales, incrementando tanto su resolución espacial como su escala temporal. La resolución de grilla espacial del modelo CAM-Chem estándar es de $1^\circ \times 2.5^\circ$ (100 km \times 250 km, aproximadamente), con emisiones promedio mensuales; mientras que en un típico modelo regional con dominios anidados en WRF-Chem, la resolución de grilla puede alcanzar los 2 km \times 2 km, incluyendo una variabilidad temporal horaria.

Para realizar la reestructuración y redimensionamiento se evaluó la posibilidad de utilizar tres metodologías diferentes, cada cual basada en una aplicación distinta:

- i. Utilizar la estructura operativa de la base de datos de emisión de Estados Unidos (US EPA, 2005), adaptando la aplicación `emiss_v3` (desarrollada exclusivamente para utilizar WRF-Chem dentro de USA) para extender su uso a bases de datos con estructura equivalente en cualquier punto del planeta.
- ii. Modificar la aplicación `prep_chem_sources` del CPTEC de Brasil (Freitas *et al.*, 2010) la cual permite extraer los datos de emisiones de distintas bases globales en formato ASCII y adaptarlos al dominio de modelado utilizado en WRF-Chem.
- iii. Acoplar las rutinas `anthro_emiss` y `bio_emiss` desarrolladas en el NCAR para procesar inventarios de emisión naturales y antropogénicos tendientes a estudios de downscaling climático regional (Hodzic and Knote, 2014).

La cantidad de datos y variables disponibles y la resolución espacio-temporal de la base de datos de Estados Unidos es prácticamente inalcanzable para otros países del mundo, por lo cual no amerita la utilización de una aplicación con la complejidad de la herramienta *emiss_v3* para los inventarios a tratar en Sudamérica. Además, los requerimientos computacionales serían considerablemente mayores sin generar ningún beneficio en sus resultados.

Si bien *prep_chem_sources* es la aplicación recomendada para los usuarios WRF-Chem que realizan estudios fuera de Europa y USA (Peckham *et al.*, 2010), posee un muy mal sistema de soporte por parte del personal de Brasil, y es notorio que fue desarrollado para trabajar con el modelo CATT-Brams (no con WRF-Chem) y por ende genera archivos de emisión en formato binario y/o ASCII que luego deben ser transformados a formato netCDF. Aún cuando hay aplicaciones que lo hacen, en la práctica es dificultoso observar gráficamente si las modificaciones aplicadas a los inventarios son las deseadas.

Por estas razones, la metodología elegida y utilizada fue la que implicaba la modificación y acoplamiento de la rutina de pre-procesamiento creada por el NCAR. Es por ello que el desarrollo de nuestra herramienta de redimensionamiento se basa en el pre-procesador *anthro_emiss*, y todas las implementaciones realizadas se fundan en la estructura interna original del programa. Los códigos originales y modificados se encuentran disponibles para cualquier persona que desee utilizarlos, contactando al responsable del trabajo.

i. REDIMENSIONAMIENTO ESPACIAL DE INVENTARIOS DE EMISIÓN

Las bases de datos utilizadas por defecto por WRF-Chem, como por ejemplo EDGAR, muestran una grilla de puntos sobre los cuales se encuentra el valor de la emisión considerada. Las emisiones son valores de flujo por unidad de área, por lo que claramente mientras mayor sea el valor de la unidad de área utilizada, entonces menor será la resolución de la emisión, y viceversa. En principio, los puntos están equiespaciados, lo que significa que las diferencias de latitud y longitud entre ellas son fijas (en coordenadas geográficas) como puede verse en la **Figura 6**.

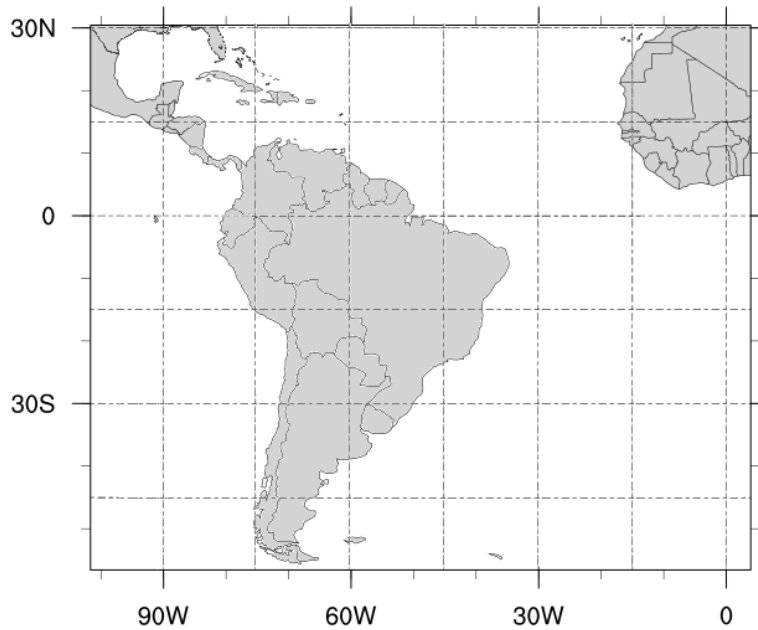


Figura 6. Grilla equiespaciada en latitud y longitud

Existen diversas proyecciones, utilizadas para minimizar el error a la hora de llevar la superficie tridimensional existente sobre una esfera a una superficie bidimensional plana. En particular, la proyección Lambert-Conformal superpone un cono sobre la superficie esférica de la Tierra, generando líneas rectas para representar a los meridianos y arcos de circunferencia concéntricos para los paralelos (Wang *et al.*, 2009). De esta manera, el error cometido es nulo a lo largo de los paralelos de referencia, y se incrementa fuera de los paralelos elegidos. Así, las distancias lineales entre los distintos puntos puede calcularse de forma correcta.

Al utilizar esta proyección para convertir la superficie esférica a un plano, los puntos del enmallado dejan de estar equiespaciados, por lo que la forma y tamaño del área de cada elemento de celda que estos delimitan, pasan a depender de los valores de latitud y longitud considerados (**Figura 7**). Por ejemplo, si se mide la distancia equivalente a 1° de longitud en el Ecuador, la misma es de 111,321 km, mientras que a 60° de latitud, 1° de longitud equivale a 55,802 km (*ArcGIS Explorer*).



Figura 7. Comparación gráfica entre las áreas barridas por dos pares de latitudes equivalentes, entre las mismas longitudes.

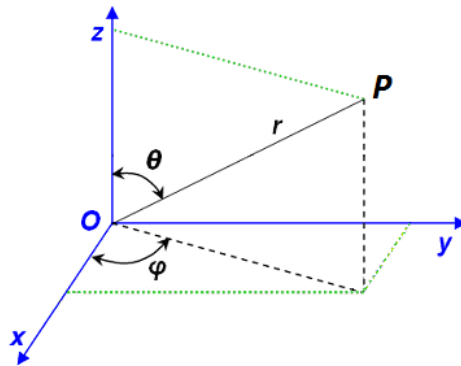


Figura 8. Definición de los ángulos utilizados en coordenadas esféricas.

Dado que el dominio utilizado abarca tanto zonas ecuatoriales como polares, los valores de área pueden variar hasta en un 40%, por tanto, se procedió a re-calculer el área de cada sector de grilla. Para ello, considerando a la Tierra como una esfera, se calculó un diferencial de superficie en coordenadas esféricas, con el valor de radio constante. Ya que todas las líneas meridionales se unen en los polos, y llamando θ al ángulo medido desde el Polo Norte, las variaciones de latitud y longitud de los cuatro puntos que delimitaban el perímetro de cada área mínima, permiten obtener:

$$dA_{(i;j)} = r_{Tierra}^2 \cdot \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \quad (1)$$

donde r_{Tierra} es el radio de la Tierra (considerado constante y con un valor de 6 371 km), θ es el valor medio de las latitudes Norte y Sur del área considerada y φ es la distancia longitudinal del área en estudio (Figura 8).

Para la aplicación de la herramienta en desarrollo se generaron tres dominios anidados, denominados **D01**, **D02** y **D03** respectivamente, con resoluciones espaciales diferentes: uno que abarca todo Sudamérica y parte de América Central, con una resolución de 36x36 km² (D01); otro centrado en Argentina, con resolución espacial de 12x12 km² (D02) y un tercer inventario de resolución 4x4 km², que abarca parte del Océano Pacífico y parte continental a la altura de la Ciudad de Mendoza (D03). La imagen esquemática de las áreas cubiertas por los tres dominios estudiados se muestra en la **Figura 9**.

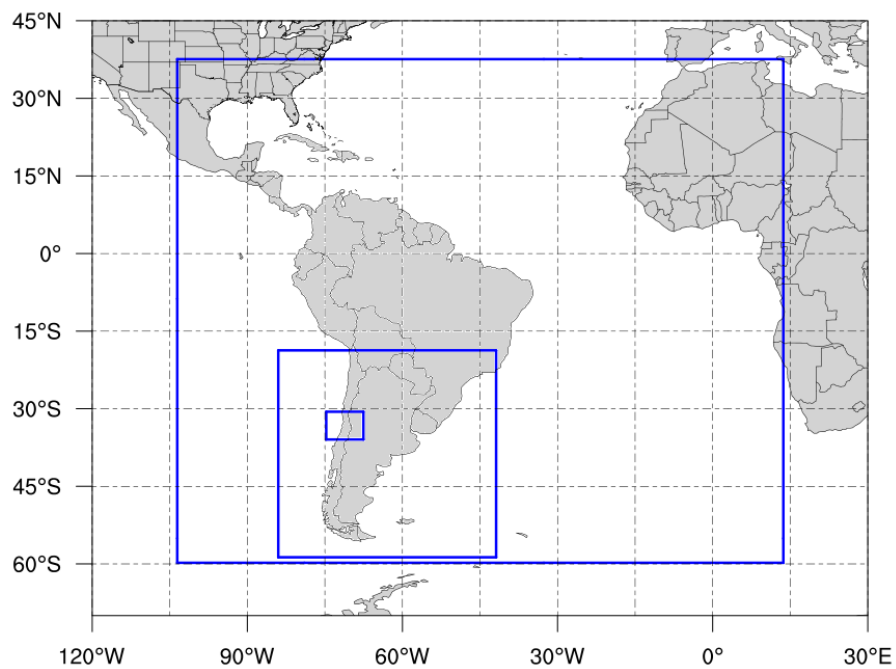


Figura 9. Dominios anidados de 36x36 km² (D01), 12x12 km² (D02) y 4x4 km² (D03).

a. EMISIONES NATURALES

El inventario global de halógenos, utilizado tanto por el modelo CAM-Chem como para obtener las condiciones iniciales y de contorno por WRF-Chem, incluye emisiones naturales para sustancias VSL con una resolución de 100 x 250 km² y estacionalidad mensual (Ordóñez *et al.*,

2012; Fernandez, Salawitch, *et al.*, 2014). Entre todas las especies VSL incluidas en el inventario, se decidió realizar el redimensionamiento del inventario para emisiones naturales de CHBr_3 (bromoformo) debido a que es la especie con mayor flujo de emisión a la atmósfera, mayor reactividad química, y por ende su impacto ambiental es más grande. Además, como el bromoformo es la principal especie halogenada emitida desde los océanos por el fitoplancton y las algas marinas, la comunidad científica posee un gran interés en conocer el comportamiento de los mismos en zonas tropicales, de latitudes medias y polares, así como la disposición en zonas de costa continental. El inventario global de Ordoñez *et al.* (2012) posee una la distribución de emisiones entre los 20° N y los 20° S , obtenida a través de imágenes satelitales de campos de clorofila, mientras que en las sucesivas franjas latitudinales se implementa un valor oceánico constante y un factor de costa de 2,5 veces el valor en el mar abierto, para dicha latitud (**Figura 10**).

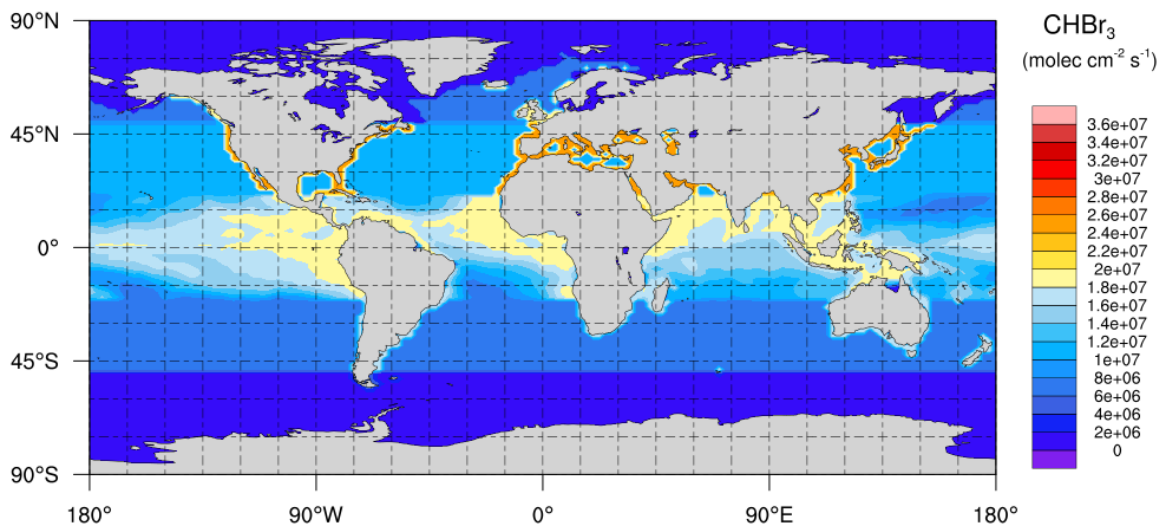


Figura 10. Emisión global de CHBr_3 del inventario global de halógenos.

El redimensionamiento espacial del inventario global de halógenos se realizó acoplado la rutina *anthro_emiss*, de forma que las emisiones originalmente equiespaciadas en una malla de $1,9^\circ \times 2,5^\circ$, fueron re-estructuradas a un dominio regional con proyección Lambert-Conformal, ya no equiespaciadas en latitudes y longitudes sino en distancias cartesianas, con resolución 30 km x30 km dentro de WRF-Chem. Para ello fue preciso generar un dominio con dicha proyección, lo cual fue posible gracias a la aplicación WPS (*WRF Preprocessing System*) incluida en el paquete WRF-Chem (Wang *et al.*, 2009). Como el inventario original posee una resolución espacial más

gruesa que la búsqueda una vez realizado el procesamiento, los valores de emisión en cada punto se obtuvieron realizando una interpolación bilineal de los valores iniciales provenientes de la grilla global ($1,9^\circ \times 2,5^\circ$, aproximadamente $100 \times 250 \text{ km}^2$) dentro de la grilla regional Lambert-Conformal con un área de $30 \times 30 \text{ km}^2$. La **Figura 11** muestra una representación esquemática de esta interpolación. Fue preciso controlar que el flujo por unidad de área en los dominios de entrada y salida fueran equivalentes, así como también que la emisión total en todo el dominio se mantuviera inalterada. Si bien no se profundizó este aspecto en esta Tesina, se observa que al tener mayor resolución, el programa permite en etapas sucesivas, poder mejorar la distinción entre los puntos de grilla que realmente representan zonas costeras y los que no. A futuro también permitirá mejorar la variabilidad espacial de las emisiones utilizando datos satelitales de clorofila en alta resolución.

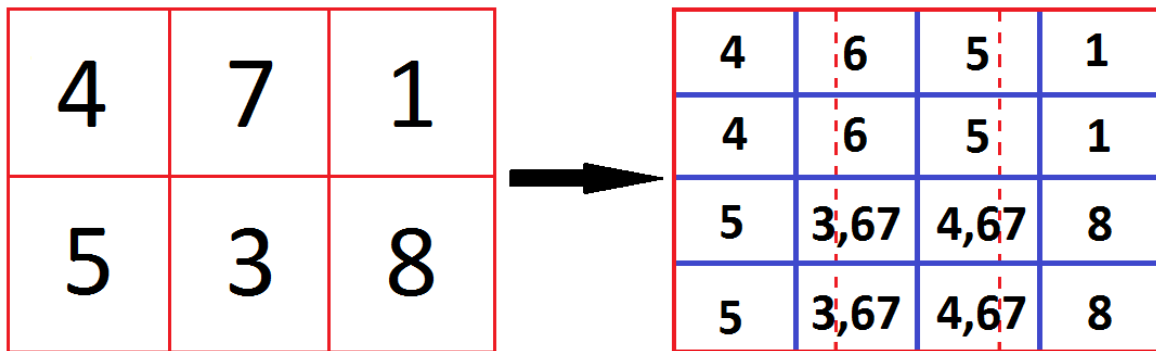


Figura 11. Interpolación de los valores al redimensionar a un grillado con mayor resolución espacial.

Una vez validado el funcionamiento en un dominio regional de $30 \times 30 \text{ km}^2$, se evaluó la aplicabilidad del código desarrollado para generar los dominios anidados con mayores resoluciones, mostradas en la **Figura 11** (algo ampliamente extendido en estudios de calidad de aire regional).

b. EMISIONES ANTROPOGÉNICAS

El inventario de emisión de gases contaminantes y de efecto invernadero de la base EDGAR incluye datos para Argentina y Sudamérica con una resolución de $0,1^\circ \times 0,1^\circ$ (aproximadamente $10 \times 10 \text{ km}^2$ para latitudes ecuatoriales) y variabilidad anual. Esto implica que puede adquirirse un mapa de emisiones por año, el cual muestra el promedio anual emitido de

una determinada especie (o un conjunto de ellas) por unidad de superficie. Además, existe una versión anterior denominada *EDGAR v3* con resolución espacial de $1^\circ \times 1^\circ$ (100 km x 100 km) implementada por defecto en WRF-Chem. Si bien esta base de datos posee cobertura global, exhibe una escasa resolución temporal y espacial. Además, difiere de manera substancial respecto a los datos obtenidos utilizando herramientas GIS de los diferentes mapas cartográficos desarrollados para Argentina (Fernandez and Puliafito, 2010).

Inicialmente se abordó el redimensionamiento espacial del inventario de EDGAR v4.2 (EDGAR, 2011), y se analizaron los campos de emisión vehicular (sector 1A3b) de CO_2 , como se muestra en la **Figura 12**, considerando los mismos tres dominios anidados descriptos anteriormente ($36 \times 36 \text{ km}^2$; $12 \times 12 \text{ km}^2$ y $4 \times 4 \text{ km}^2$ respectivamente). De manera idéntica a lo realizado para el inventario de emisiones naturales, se realizó la mencionada interpolación bilineal de los valores iniciales. Esto permitió que el inventario tenga dentro de cada dominio una resolución espacial reducida a la hora de mirar regiones amplias (como por ejemplo todo Sudamérica, en el cual no existe la necesidad de una resolución extremadamente alta), y otra mayor al mirar dominios más pequeños, como puede ser una ciudad.

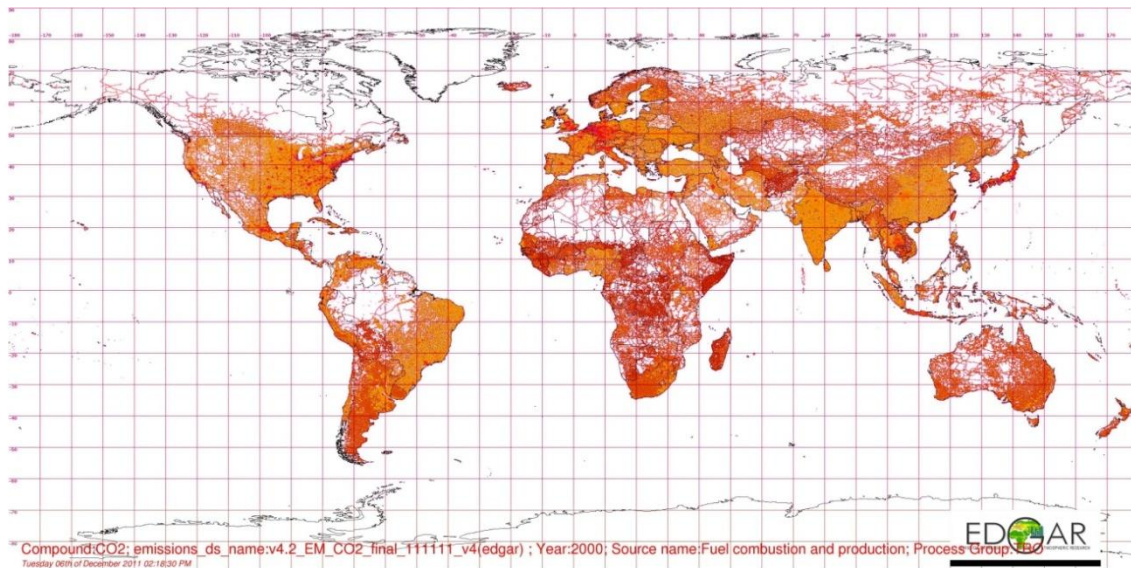


Figura 12. Emisiones globales vehiculares de CO_2 para el año 2011 según el inventario de EDGAR.

Debido a que el análisis deseado iba a realizarse sobre la superficie del Territorio Argentino continental (ya que la base de datos de GEAA sólo posee valores de emisión vehicular para Argentina), y se partía de un inventario global de emisiones, fue necesario incorporar una

variable nueva a la herramienta de redimensionamiento que incluyera la división política entre los diferentes países. Dicha variable, a la cual denominamos POLIT_MAP y no incluida por defecto en WPS, permite seleccionar países (y hasta zonas dentro de algunos países para ciertos casos) por medio de un índice numérico. Al designar un país, se consideran las emisiones generadas solamente dentro de su territorio, algo indispensable para analizar cuantitativamente las emisiones totales en un determinado sector, así como para minimizar efectos de fuentes de emisión cercanas a la frontera pero fuera del territorio seleccionado. De esta manera, en los inventarios post-procesados aparece la nueva variable POLIT-MAP, desarrollada para asignar el mencionado índice numérico a cada país por medio de una división política (**Figura 13**). Este desarrollo se incluyó en la herramienta WPS del sistema de modelado WRF-Chem.

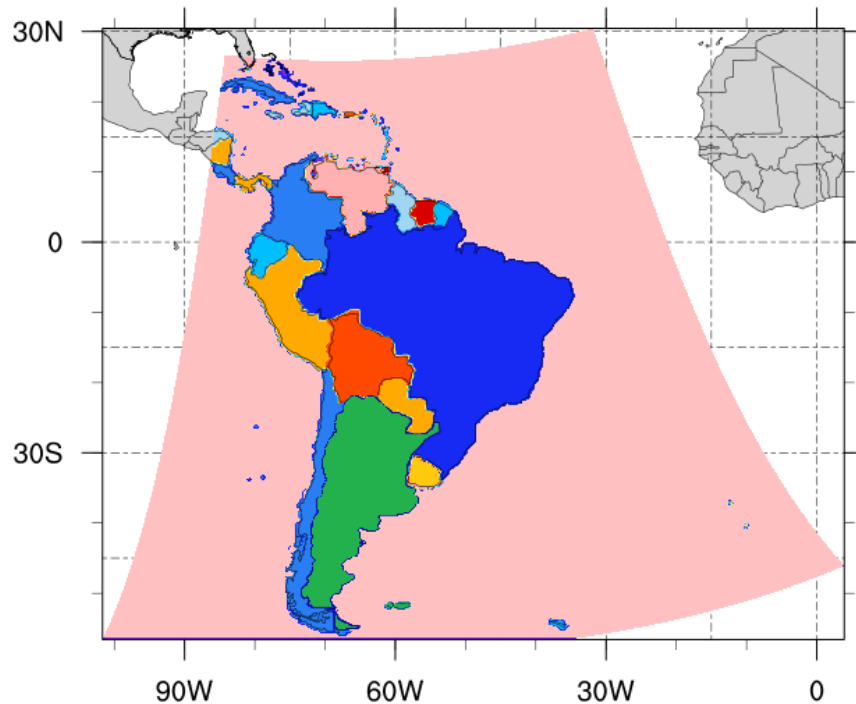


Figura 13. Mapa político implementado al dominio d01. Los diferentes colores se asocian a valores numéricos, distintos para cada país.

Luego de esto y siguiendo con la misma metodología, se adaptaron los inventarios de emisión vehicular desarrollados por el grupo GEAA UTN-FRM (Castro, Allende and Puliafito, 2009; Fernandez, Cremades, *et al.*, 2014). En particular, se tomaron las emisiones vehiculares de CO₂ de la base de datos proporcionada por el GEAA para obtener mapas equivalentes que permitieran

posteriormente comparar la distribución espacial con respecto a las obtenidas a partir del inventario de EDGAR.

Como el inventario original del GEAA tiene mejor resolución que los impuestos en los tres dominios anidados (2,5x2,5 km²), al realizar el redimensionamiento se promediaron todos los valores de emisión presentes dentro de cada nuevo espacio de grilla, tal cual se muestra en la **Figura 14**. De esta manera, si bien la resolución obtenida fue menor que la original, permitía realizar una comparación específica entre los inventarios utilizados (EDGAR y GEAA) para una misma especie, y con idénticas resoluciones entre sí.

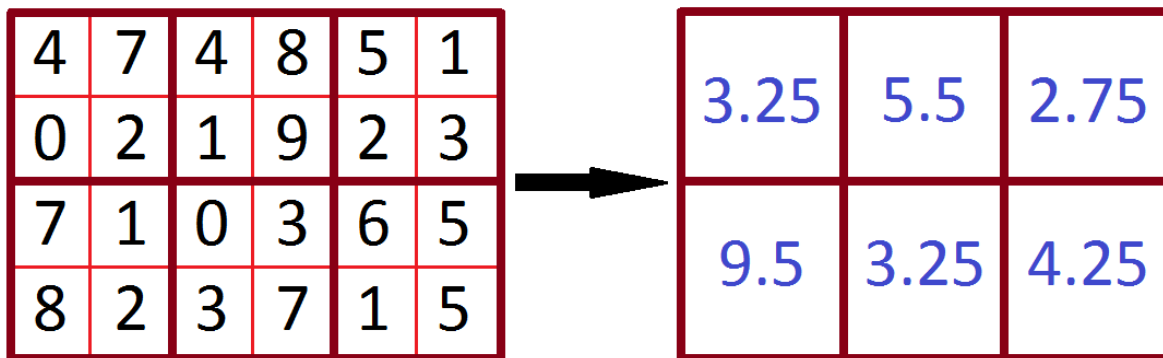


Figura 14. Promediado de los valores al redimensionar a un grillaado con menor resolución espacial.

ii. REDIMENSIONAMIENTO TEMPORAL DE INVENTARIOS DE EMISIÓN

Probablemente la principal ventaja introducida a la herramienta *anthro_emiss*, que no se encuentra disponible en ninguna de las versiones originales provistas por los desarrolladores del NCAR, consta en la posibilidad de introducir un perfil temporal (tanto horario como estacional) a las emisiones dependiendo de factores geográficos y o socio-culturales. A la hora de diferenciar las emisiones generadas naturalmente de las dependientes de la acción del hombre, deben tenerse en cuenta las condiciones en las cuales se genera cada una, y los factores que modelan cuánto se emite en cada momento. Existen, por ejemplo, diversos procesos fisicoquímicos naturales dependientes de la radiación solar incidente. Esto implica que los procesos emisivos no sólo dependen de la intensidad de la radiación solar, sino también de la cantidad de horas que esta incida. De esta manera, se vuelve indispensable considerar factores que muestren tanto la

estacionalidad en cada punto del dominio en cada época del año así como la variabilidad horaria (día/noche) para cada punto del planeta, y de esta manera modelar la cantidad de luz solar que llega a cada latitud en cada época el año.

Por otro lado, las emisiones generadas enteramente por actividad humana, como pueden ser las emisiones vehiculares o industriales, en general no dependen fuertemente de la época del año en la que se encuentre (salvo el consumo de gas para calefacción, que aumenta en invierno) pero sí de factores horarios propios del comportamiento socio-económico de cada sector. Los perfiles temporales que pueden asociarse a cada fuente de emisión pueden ser completamente diferentes, y hasta dentro del mismo sector pueden variar para las diferentes especies emitidas. A su vez, al analizar zonas o países con situaciones disímiles, aparecen en consideración condiciones sociales, económicas y culturales locales.

Se planteó entonces la necesidad de generar una serie de modificaciones sobre la herramienta de redimensionamiento presentada, con el fin de que la misma permitiese asignar un perfil temporal particular a cada especie química emitida que quisiera estudiarse.

La resolución temporal buscada fue horaria, es decir que al momento de generar las emisiones para un día en particular, se obtuviesen 24 archivos diferentes, uno para cada hora. Si bien *anthro_emiss* incluye por defecto la posibilidad de obtener estos 24 archivos, el problema que tiene es que asigna el mismo valor constante para cada uno de los 24 instantes. Una importante ventaja que posee el código presentado es que permite seleccionar el comportamiento temporal deseado, asignando a cada uno de los 24 archivos de salida por cada día un factor horario en particular. Como alternativa se implementó una segunda configuración, que internamente seguía manteniendo los 24 conjuntos de datos, ordenados en dos archivos que contenían la información correspondiente a 12 horas cada uno. La herramienta mostró la misma funcionalidad tanto si tiene que generar los 24 archivos por separado (*modo Serial*) como si debe generar los dos archivos de mayor tamaño (*modo Dual*).

La idea de contar con modo Dual, es que brinda la posibilidad de realizar modelados en los cuales las emisiones diarias son iguales durante todos los días del período seleccionado. En el modo Serial, la variación horaria para los días sucesivos de la modelación puede variar, y se informa un valor puntual para cada hora de cada día. Si bien esto presupone un modelado más

preciso, es a su vez computacionalmente mucho más costoso e incrementa notoriamente la capacidad de almacenamiento.

Para realizar la redistribución de la emisión diaria en un punto de grilla a flujos horarios, el valor de emisión diaria se dividió en 24 y se le asignó dicho valor a cada archivo obtenido. Luego, la implementación de los factores horarios pudo hacerse para cada archivo, siempre asegurando que la emisión sumada luego de 24 horas fuese la misma sin importar el perfil temporal utilizado (aún si se continuaba utilizando el perfil de emisión constante), e igual al valor total diario del que se partió.

a. EMISIONES NATURALES

Se analizaron diferentes tipos de perfiles temporales diurnos para las emisiones naturales oceánicas, basadas en el comportamiento emisivo temporal del Alfa-pineno y del Isopreno a la atmósfera (Ordóñez *et al.*, 2012).

Para determinar la cantidad total de radiación que llega a cada punto de la superficie de la tierra en el transcurso de un día, es necesario tener en cuenta el Ángulo Cenital Solar (SZA), que es el ángulo formado entre la recta normal en cada punto de la superficie terrestre y la posición del Sol relativa a dicho punto. El SZA depende de la latitud del punto estudiado (θ), la declinación solar (δ) y el ángulo horario (A), como puede observarse en la **Figura 15**. La declinación solar es el ángulo formado entre la línea imaginaria que une el Sol con la Tierra y el plano ecuatorial celeste, es decir la proyección del ecuador terrestre. De esta manera, el coseno del Ángulo Cenital Solar, **cos (SZA)**, posee una dependencia respecto de la latitud a la que se encuentre el punto del mapa, la hora del día en ese punto del planeta y la época del año en que se esté analizando.

El factor introducido se calculó como:

$$\cos (SZA) = \cos(\delta) \cdot \cos(\theta) + \text{sen}(\delta) \cdot \text{sen}(\theta)$$

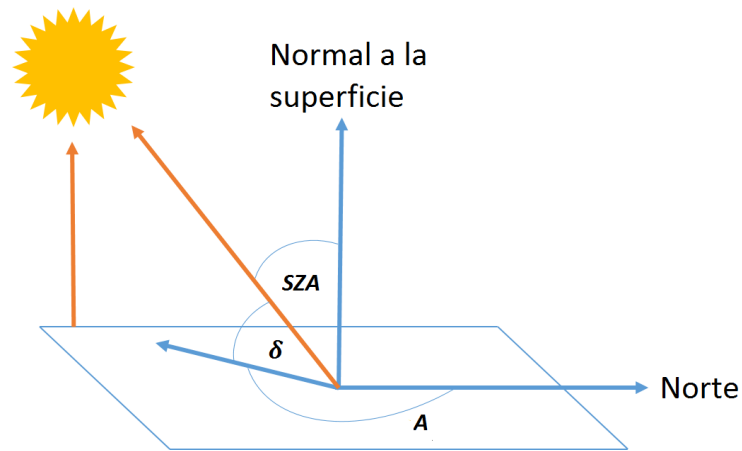


Figura 15. Representación de los ángulos que participan en el cálculo del $\cos(\text{SZA})$.

Cabe destacar que en todos los casos se tuvo como premisa que el valor de la emisión total diaria para cada total diaria para cada uno de los meses considerados en el inventario global de CAM-Chem, debía mantenerse igual al mantenerse igual al correspondiente valor extraído de la base de datos global. A continuación se muestran las muestran las expresiones matemáticas para cada uno de los perfiles temporales utilizados (

Tabla 2), junto con la información detallada para cada uno de los perfiles propuestos y sus respectivas modificaciones.

Tabla 2. Descripción de algunos perfiles temporales incluidos en la herramienta de redimensionamiento.

ESPECIE	DÍA	NOCHE
Alfa-pineno	$y_{\alpha-p}(i,j) = \left(\frac{1}{f_{\varepsilon} + (1 - f_{\varepsilon}) \cdot d_f} \right) \cdot y(i,j)$	$y_{\alpha-p}(i,j) = f_{\varepsilon} \cdot \left(\frac{1}{f_{\varepsilon} + (1 - f_{\varepsilon}) \cdot d_f} \right) \cdot y(i,j)$
Alfa-pineno SZA	$y_{\alpha-p_SZA}(i,j) = \left(\frac{\cos(SZA)}{d_f} \right) \cdot y_{\alpha-p}(i,j)$	$y_{\alpha-p_SZA}(i,j) = f_{\varepsilon} \cdot \cos(SZA) \cdot y_{\alpha-p}(i,j)$
Isopreno	$y_{isop}(i,j) = \left(\left(\frac{2}{d_f} \right) \sin^2 \left(\frac{1}{2d_f} \right) \right) \cdot y(i,j)$	$y_{isop}(i,j) = 0$
Isopreno SZA	$y_{isop_SZA}(i,j) = \left(\left(\frac{2}{d_f} \right) \sin^2 \left(\frac{1}{2d_f} \right) \right) \cdot \cos(SZA) \cdot y(i,j)$	$y_{isop_SZA}(i,j) = 0$
Isopreno (Noche)	$y_{isop_N}(i,j) = \left(1 + \left(\frac{f_{\varepsilon}}{f_{\varepsilon} + (1 - f_{\varepsilon}) \cdot d_f} \right) \left(\left(\frac{2}{d_f} \right) \cdot \sin^2 \left(\frac{\pi}{f_{\varepsilon} + (1 - f_{\varepsilon}) \cdot d_f} \right) - 1 \right) \right) \cdot y(i,j)$	$y_{isop_N}(i,j) = \left(\frac{f_{\varepsilon}}{f_{\varepsilon} + (1 - f_{\varepsilon}) \cdot d_f} \right) \cdot y(i,j)$
Isopreno (Noche + SZA)	$y_{ISN}(i,j) = \left(1 + \left(\frac{f_{\varepsilon}}{f_{\varepsilon} + (1 - f_{\varepsilon}) \cdot d_f} \right) \left(\left(\frac{2}{d_f} \right) \cdot \sin^2 \left(\frac{\pi}{f_{\varepsilon} + (1 - f_{\varepsilon}) \cdot d_f} \right) - 1 \right) \right) \cdot \cos(SZA) \cdot y(i,j)$	$y_{ISN}(i,j) = \left(\frac{f_{\varepsilon}}{f_{\varepsilon} + (1 - f_{\varepsilon}) \cdot d_f} \right) \cdot \cos(SZA) \cdot y(i,j)$

- d_f es la fracción diaria con luz solar (hs día/24hs). Se calcula para cada celda de grilla del dominio conociendo la hora del día en la que amanece y anochece en cada punto del planeta. Esto puede obtenerse a partir de estudios geométricos de la radiación incidente sobre una esfera.
- f_{ε} es el factor que define el porcentaje emitido durante las horas nocturnas con respecto al emitido durante las horas de luz solar.
- $\cos(SZA)$ es el coseno del Ángulo Cenital Solar.

Alfa-pineno

El Alfa-pineno es un compuesto orgánico emitido principalmente por la vegetación continental. La cantidad de Alfa-pineno generada depende, entre otras cosas, de la radiación solar incidente, así como de la temperatura. En la atmósfera, el Alfa-pineno reacciona generando especies de baja volatilidad que se condensan parcialmente en aerosoles existentes, generando de este modo aerosoles orgánicos secundarios. El perfil temporal del Alfa-pineno es una función rectangular (tipo top-hat), debido a que es necesaria la presencia de radiación para que se comience a emitir. Pero tan pronto como se supera un umbral mínimo para iniciar el proceso oxidativo (etapa determinante), las etapas posteriores son rápidas y la emisión deja de depender de la intensidad de la radiación. Este perfil horario representa a aquellas emisiones que toman un valor mínimo cuando no hay radiación solar incidente (cuando es de noche), y un valor máximo constante cuando se tiene algún valor de luz natural distinto de cero. Las funciones que representan el comportamiento de las emisiones de Alfa-pineno tanto en el día como en la noche se encuentran en la **Tabla 2**.

Alfa-pineno SZA

Con la intención de realizar una comparación completa de los diferentes factores temporales que afectan la emisión de sustancias naturales (esto es, la cantidad de horas de día/noche y la intensidad de radiación incidente en cada estación), se aplicó un factor de corrección que tiene en cuenta el coseno del Ángulo Cenital Solar (SZA) al perfil de emisión del *Alfa-pineno*. El perfil *Alfa-pineno* se modifica entonces de manera que los valores de emisión dependen de la época del año en la cual se está analizando la emisión, es decir, de la estacionalidad. Las funciones que representan el comportamiento de las emisiones de Alfa-pineno, con la inclusión del factor dependiente del coseno de SZA, tanto en el día como en la noche se encuentran en la **Tabla 2**.

Isopreno

El Isopreno es un compuesto orgánico emitido principalmente por vegetación continental, aunque también se produce industrialmente por el hombre. Al igual que en el caso del Alfa-pineno, la cantidad de Isopreno generada por la vegetación depende principalmente de la

radiación solar incidente y de la temperatura. El perfil temporal de emisión del Isopreno puede asimilarse a una función periódica positiva (tipo sen^2). Este perfil horario muestra valores nulos de emisión cuando no hay radiación solar incidente, mientras que en las horas diurnas presenta un perfil de tipo seno cuadrado para un periodo completo, cuyo máximo aparece en el horario de mayor radiación incidente. Este perfil temporal ha sido utilizado en estudios globales para representar la emisión de VSLs (Fernandez, Cremades, *et al.*, 2014; Saiz-Lopez *et al.*, 2014). Las funciones que representan el comportamiento de las emisiones de Isopreno tanto en el día como en la noche se encuentran en la **Tabla 2**.

Isopreno SZA

Si bien el perfil temporal de emisión del Isopreno posee una dependencia horaria para cada punto del planeta, la misma solamente considera la variabilidad en la cantidad de horas de día/noche en cada punto de grilla, y no la intensidad máxima de radiación incidente para cada día. Esto es muy importante ya que, además de incrementar la cantidad de horas diurnas, la intensidad de radiación se maximiza durante el verano, mientras que lo opuesto ocurre en invierno (algo muy notorio en latitudes intermedias). Se propuso entonces una modificación del perfil *Isopreno* descrito en el punto anterior, donde se considera el factor que tiene en cuenta el \cos SZA. Las funciones que representan el comportamiento de las emisiones de Isopreno con la inclusión del factor dependiente del coseno del SZA tanto en el día como en la noche se encuentran en la **Tabla 2**.

Isopreno (Noche)

En paralelo se evaluó una modificación del perfil *Isopreno*, donde se considera un valor de emisión mínimo constante no nulo en las horas en las que no hay radiación solar incidente. Esta aproximación se basa en que la producción de VSLs en los océanos ocurre por diversos mecanismos, algunos de los cuales no necesariamente son iniciados por procesos fotoquímicos, sino por reacciones de oxidación del material orgánico por nitritos y otras sustancias presentes en los océanos (Carpenter, Jones and Dunk, 2009). Esto provoca que los valores máximos de emisión sean menores a los encontrados en el perfil *Isopreno* estándar, ya que la emisión total diaria (representada por el área bajo la curva) en el período completo de 24 hs debe ser idéntica (ver

Figura 16 debajo). Las funciones que representan el comportamiento de las emisiones de Isopreno con la inclusión del factor de emisión nocturna tanto en el día como en la noche se encuentran en la **Tabla 2**.

Isopreno (Noche + SZA)

Finalmente, se propuso un nuevo perfil *Isopreno*, donde se consideran ambas modificaciones planteadas anteriormente: es decir, un valor de emisión mínimo constante no nulo en las horas en las que no hay radiación solar incidente, y la dependencia del coseno del SZA. Esto provoca que los valores máximos de emisión sean menores a los encontrados en el perfil *Isopreno*, ya que la emisión total diaria (representada por el área bajo la curva) debe ser idéntica. Las funciones que representan el comportamiento de las emisiones de Isopreno incluyendo la dependencia con el coseno del SZA y la emisión nocturna tanto en el día como en la noche se encuentran en la **Tabla 2**.

Una comparación gráfica de cada uno de los perfiles anteriormente mencionados se muestra en la **Figura 16**. Además se agrega un perfil temporal constante, que es el promedio de 24 hs original para las emisiones de CHBr_3 en el inventario de Ordoñez et al. (2012) para un punto particular del océano atlántico.

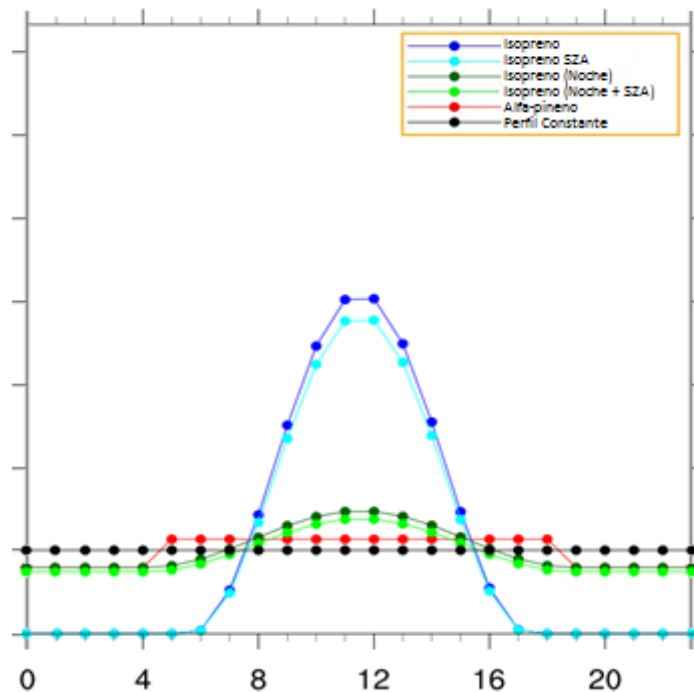


Figura 16. Perfiles temporales de emisión propuestos para especies VSL.

b. EMISIONES ANTROPOGÉNICAS

En el caso de las emisiones antropogénicas, los perfiles temporales observados dependen de diferentes dinámicas sociales, económicas, culturales, y muchas veces también se ven marcadas por las condiciones geopolíticas de un país o una región. Al analizar dominios que incluyan varios países o regiones espaciales, debe tenerse en cuenta la diversidad en alguno o varios de estos factores. Muchas veces un país tiene los mismos perfiles temporales de actividades socio-económicas en todo su territorio, aunque el mismo sea de gran extensión.

Al comparar dominios dentro del territorio Argentino, aparecen grandes variaciones en dinámicas sociales que repercuten directamente sobre el comportamiento de ciertas fuentes de emisión, como puede ser el tráfico vehicular. Por ejemplo, en Buenos Aires el trabajo se realiza en horario corrido, generando un perfil temporal vehicular diferente al que aparece en ciudades como Mendoza, con doble horario de trabajo (mañana y tarde). Del mismo modo, los perfiles temporales de emisión vehicular suelen diferenciarse severamente de los que aparece en rutas nacionales, zonas rurales, poblados pequeños, etcétera.

En general, la mayoría de los países poseen un único huso horario para todo su territorio. Sin embargo, países como USA poseen 4 husos horarios dada su gran extensión Este-Oeste, así como en muchos casos ciudades de países distintos muy cercanas entre sí poseen husos horarios diferentes (por ejemplo Mendoza y Santiago de Chile). Es necesario entonces conocer el horario específico de cada zona de un determinado dominio. Por esta razón y siguiendo con la misma metodología aplicada a los mapas políticos, se agregó al WPS una variable no considerada por defecto en WRF-Chem, denominada TIME_ZONE, que define en cada punto de grilla continental la zona horaria correspondiente. De esta manera y nuevamente a través de un índice numérico, se asigna un valor a la variable TIME_ZONE para cada uno de los países definidos anteriormente, la cual se suma a la variable POLIT_MAP. El valor determinado por la nueva variable hace referencia a la hora local respecto al Tiempo Medio de Greenwich (GMT) (**Figura 17**).

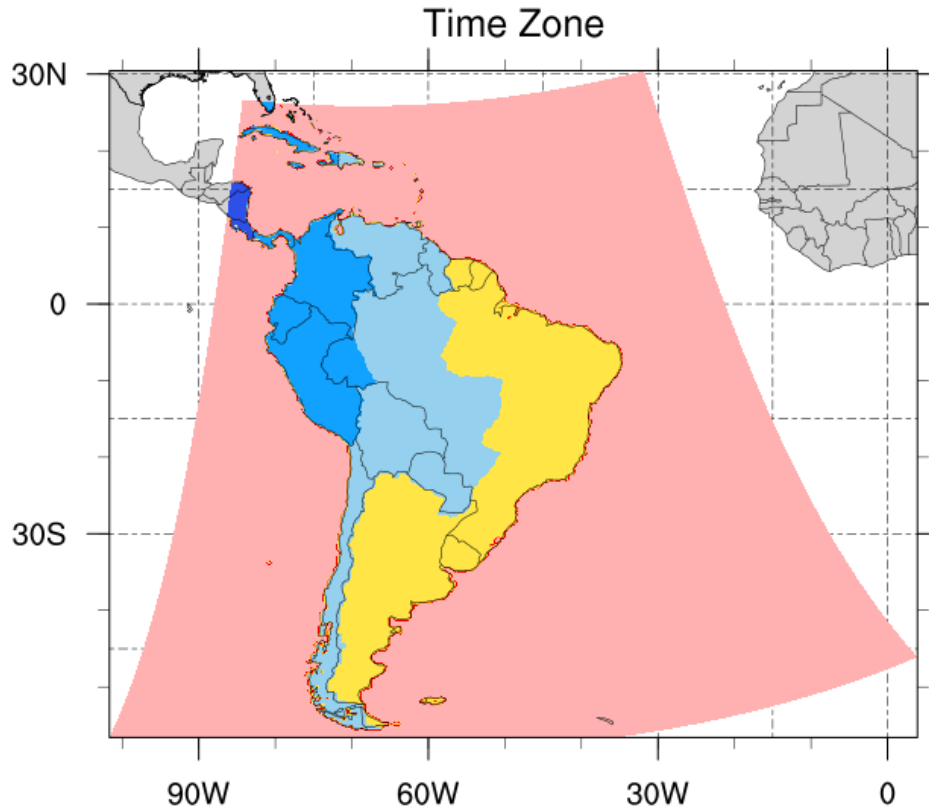


Figura 17. Husos horarios presentes en Sudamérica.

Con la intención de incorporar el comportamiento socio-económico de las emisiones antropogénicas vehiculares se evaluaron dos perfiles temporales asociados a comportamientos vehiculares diarios para la Provincia de Mendoza y las principales rutas del país. Uno de ellos representa el comportamiento vehicular urbano, es decir considerado sólo en la Ciudad de Mendoza y alrededores, mientras que el segundo perfil representa el comportamiento vehicular rural, es decir, centrado en las rutas Nacionales y Provinciales (**Figura 18**). Cada uno de ellos se obtuvo mediante la combinación de muestreos y análisis de tipo Top-down y Bottom-up (Castro, Allende and Puliafito, 2009; Puliafito *et al.*, 2015). Es importante destacar que los factores utilizados para cada uno de los valores de emisión horarios son discretos y se encuentran normalizados, es decir que en el período de 24 horas, el perfil representa una emisión total unitaria que implica que el total de emisión diario es equivalente al obtenido para el mismo sector sin considerar un perfil temporal. La herramienta desarrollada permite que los perfiles temporales impuestos puedan ser tanto una función continua como valores discretos. Si bien se evaluaron solamente 2 perfiles temporales vehiculares, la estructura modular del código permite

reemplazarlos fácilmente e incluso modificar o incorporar nuevos perfiles temporales que representen el comportamiento vehicular en otras regiones, y/o aplicar perfiles horarios a otras fuentes de emisión provenientes de otros sectores como son el industrial, residencial, transporte aeronáutico y pluvial, etc.

Tabla 3. Factor temporal asignado a la emisión horaria para la obtención del Perfil Temporal Rural.

	Horas del día											
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Perfil Rural (Porcentual)	2,43	1,71	1,24	1,11	1,43	2,33	3,65	5,06	5,44	5,46	5,39	5,55
Perfil Rural Normalizado	0,0243	0,0171	0,0124	0,0111	0,0143	0,0233	0,0365	0,0506	0,0544	0,0546	0,0539	0,0555

	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
Perfil Rural (Porcentual)	5,35	5,14	5,27	5,62	5,94	6,26	6,03	5,66	4,94	3,94	2,91	2,15
Perfil Rural Normalizado	0,0535	0,0514	0,0527	0,0562	0,0594	0,0626	0,0603	0,0566	0,0494	0,0394	0,0291	0,0215

Tabla 4. Factor temporal asignado a la emisión horaria para la obtención del Perfil Temporal Urbano.

	Horas del día											
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Perfil Urbano (Porcentual)	2,40	1,91	1,52	1,22	1,48	1,78	3,53	7,09	8,82	5,89	4,68	4,79
Perfil Urbano Normalizado	0,024	0,0191	0,0152	0,0122	0,0148	0,0178	0,0353	0,0709	0,0882	0,0589	0,0468	0,0479

	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
Perfil Urbano (Porcentual)	5,09	6,11	3,79	3,77	3,83	3,98	4,49	6,00	6,43	4,69	3,72	3,00
Perfil Urbano Normalizado	0,0509	0,0611	0,0379	0,0377	0,0383	0,0398	0,0449	0,06	0,0643	0,0469	0,0372	0,03

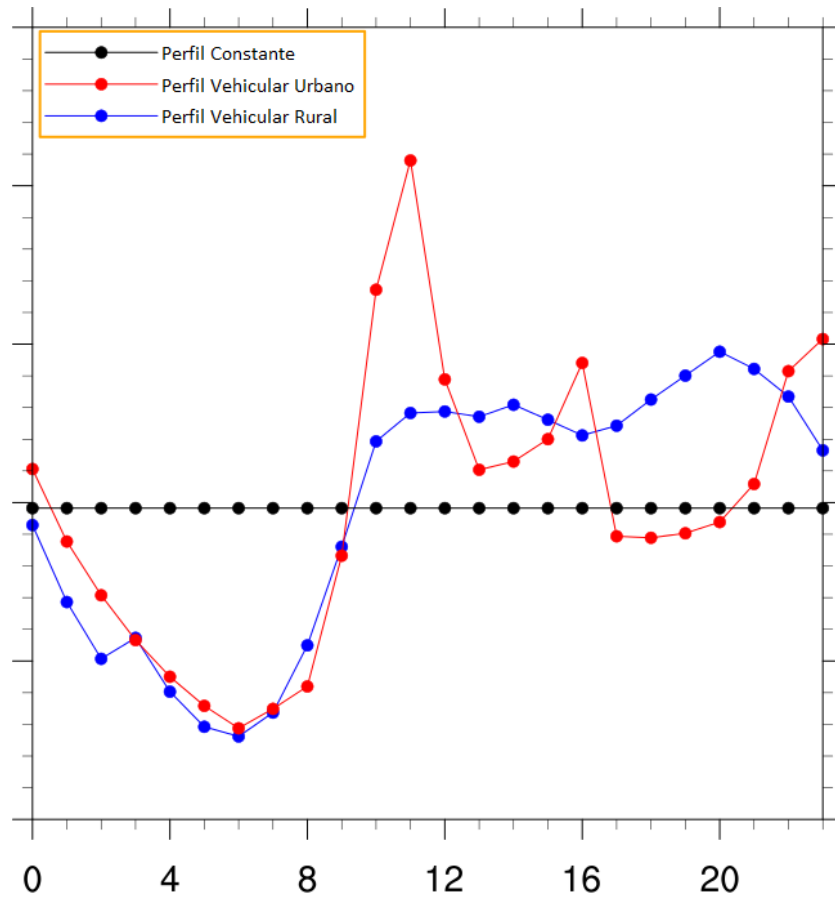


Figura 18. Ejemplos de perfiles temporales de emisión vehicular Rural (línea punteada azul), Urbana (Ciudad de Mendoza, línea punteada roja) y Constante (línea punteada negra).

4. RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados obtenidos para el redimensionamiento espacial y temporal de inventarios de emisión, tanto para fuentes naturales como antropogénicas. Los mismos se muestran en forma cualitativa, mediante la utilización de mapas y gráficas de curvas que permitan observar de manera general los cambios obtenidos en la resolución espacial y temporal. A su vez, se muestran análisis estadísticos comparativos con la intención de cuantificar los cambios introducidos en los inventarios para diferentes regiones representativas dentro de los dominios espaciales seleccionados.

i. REESTRUCTURACIÓN DE INVENTARIOS DE EMISIONES NATURALES

a. REDIMENSIONAMIENTO ESPACIAL

El redimensionamiento espacial realizado sobre el inventario de emisiones naturales de CHBr_3 oceánico obtenido de la base de datos de CAM-Chem, permite observar una marcada diferencia en la forma con la que los valores de emisión se aproximan a su valor máximo al acercarse a zonas costeras, tanto para latitudes ecuatoriales como en latitudes intermedias. Al tomar un valor máximo de emisión en el punto de grilla oceánico más cercano a la costa para una determinada latitud, y sabiendo que este valor es 2,5 veces mayor que el de emisión en esa latitud en zonas oceánicas alejadas del continente, la cantidad de puntos que puedan considerarse en esa zona permite ver con mayor claridad el comportamiento de las emisiones.

En la Figura 19 se presentan los resultados obtenidos luego de realizado el redimensionamiento espacial de emisiones oceánicas de bromoformo, para dos latitudes diferentes en Sudamérica (5° Sur y 30° Sur).

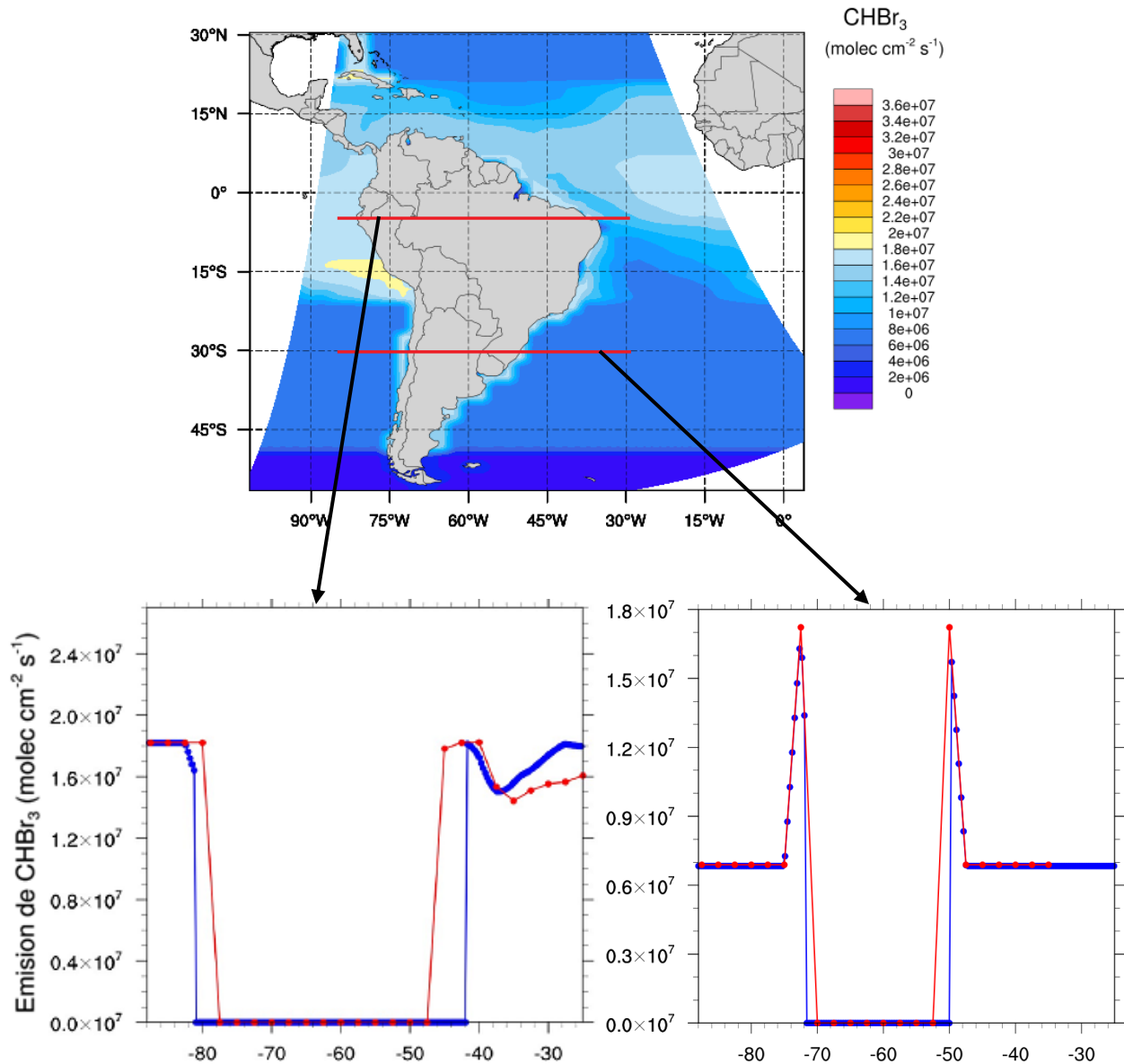


Figura 19. Latitudes analizadas para las emisiones de bromoformo oceánico (Arriba). Variación longitudinal de la emisión de CHBr_3 para latitudes de 5° Sur (Abajo, Izquierda) y 30° Sur (Abajo, Derecha) con resoluciones de $1^\circ \times 2.5^\circ$ (curva roja) y de $36 \times 36 \text{ km}^2$ (curva azul).

Al estudiar los valores de emisión para las latitudes mencionadas anteriormente, se encuentra que, si bien los valores máximos obtenidos antes y después del procesamiento se mantienen dentro del mismo orden, la forma en la que los valores de emisión varían al acercarse a la costa es marcadamente distinta. Además, como para las dos latitudes estudiadas los valores de emisión deben hacerse nulos al encontrarse dentro de la zona continental, la nueva resolución espacial permite encontrar con mayor claridad el límite entre el océano y el continente. Es por

esta razón que, para determinadas latitudes, la locación del primer valor nulo cambia, es decir que se define con mayor resolución también la costa continental. Con la finalidad de mejorar la estimación de los valores máximos en las zonas costeras, el modelo CAM-Chem posee una variable denominada OCNFRAC, que indica la fracción del área de cada grilla que ocupa el océano (*CESM / Community Earth System Model*).

Resulta importante destacar que el comportamiento en la zona costera observado en los inventarios obtenidos con alta resolución no parece ser el indicado. Debido a que la producción de estas sustancias puede incrementarse localmente en zonas con efluentes antropogénicos, se esperaría ver un máximo en el primer punto fuera del continente, decayendo exponencialmente hasta el valor característico en el océano abierto (fuera de la zona costera). Esto no se observa en la **Figura 19**, debido a que la rutina simplemente redimensiona el inventario global del que parte. Sin embargo, se prevé a futuro implementar un factor de costa que no sólo se aplique a los puntos de grilla cercanos a la costa, sino que tenga en cuenta la distancia al continente a la hora de computar el incremento proporcional.

b. REDIMENSIONAMIENTO TEMPORAL

La **Figura 20** presenta los resultados obtenidos luego de realizado el redimensionamiento temporal sobre el inventario de emisiones naturales. El mismo se basó en la implementación de diferentes perfiles temporales a las emisiones naturales de CHBr_3 descritos en la metodología. Puede observarse la comparación gráfica para cada uno de los perfiles impuestos, tanto en Verano como en Invierno, en donde el cos (SZA) toma un valor de 0.9401 y 0.4709, para un punto de latitud 40° Sur y longitud 5° Oeste (*NOAA Solar Position Calculator*).

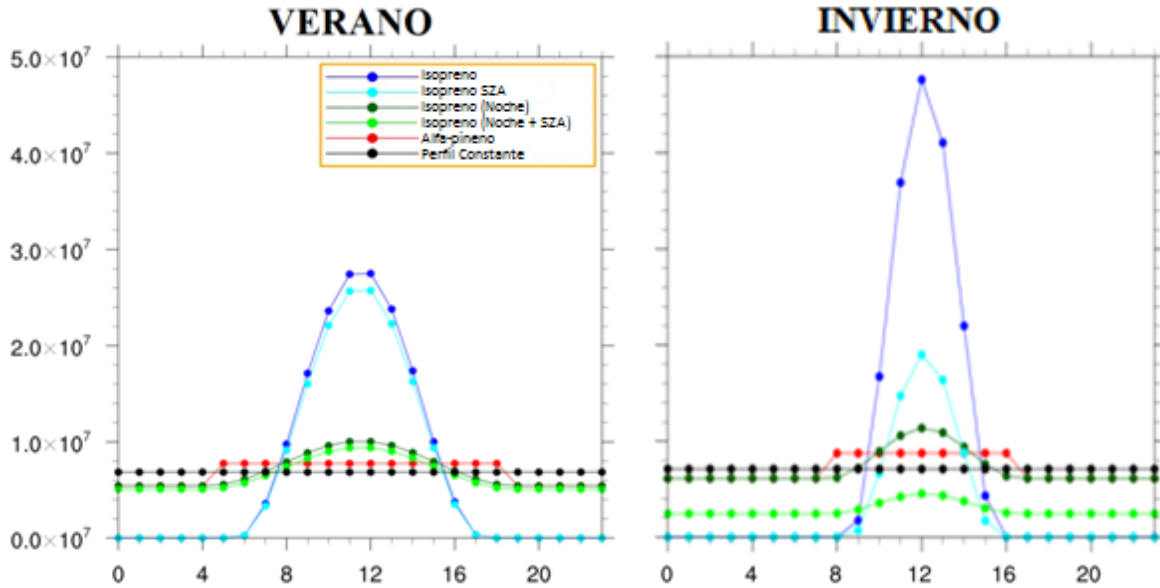


Figura 20. Perfiles temporales de emisión para especies VSL en Verano (Izquierda) e Invierno (Derecha).

Las modificaciones realizadas sobre los perfiles originales del Alfa-pineno y del Isopreno, dejan ver claramente que la inclusión de factores como la variación de la estacionalidad modifica substancialmente el comportamiento de las emisiones, dando lugar a la posibilidad de obtener perfiles emisivos cada vez más cercanos a los observados en la naturaleza.

Se observa que, si no se incluye ningún factor que contemple el SZA, los máximos de emisión resultan mayores en invierno que en verano, a fin de compensar la menor cantidad de horas de radiación solar incidente para un dado valor de emisión diaria. Claramente este no es un comportamiento fenomenológico natural, y la inclusión del coseno del Ángulo Cenital permite corregirlo.

Además, los perfiles que han sido modificados con la finalidad de que el valor de emisión nocturno sea distinto de cero, muestran una correcta normalización al valor total de emisión diaria, es decir, que al aumentar el valor mínimo de emisión disminuye el valor máximo, de manera que la emisión total permanezca constante e igual al valor original para el período de 24 horas. Si bien los perfiles temporales que incluyen emisiones durante la noche muestran nuevamente que los máximos de emisión en invierno son mayores que en verano, la inclusión del factor del SZA logra corregir dicho comportamiento. Esto deja ver que tanto los factores de emisión nocturna como el de la inclinación terrestre pueden ser implementados simultáneamente

y los resultados obtenidos son satisfactorios.

Es importante destacar nuevamente que si bien se muestran sólo dos perfiles temporales y sus modificaciones, se consiguió comprender la forma de modelar diversas parametrizaciones de emisión e implementarle factores de importancia en cada caso, lo que deja abierta la posibilidad de implementar nuevos perfiles a futuro, con la intención de considerar nuevas condiciones que impliquen modificaciones esenciales sobre los mismos.

En la **Figura 21** puede observarse un panel en el cual se muestra la distribución geográfica de las emisiones de Isopreno con los factores de emisión nocturna y $\cos SZA$, obtenidas cada tres horas para el transcurso de las 24 horas de un día de verano. Aquí se aprecia claramente la forma en la que evoluciona temporalmente la emisión en cada parte del dominio. Se encuentra disponible una serie de videos y animaciones para cada uno de los perfiles temporales propuestos.

Si bien la forma que presenta cada una de las curvas obtenidas permite realizar conclusiones cualitativas respecto al comportamiento de cada una de ellas, resulta primordial comparar cuantitativamente los valores de emisión hallados para cada curva, en cada hora. Además, como todos los perfiles temporales están impuestos sobre el mismo valor total de emisión para el día completo, la comparación entre los diversos perfiles en una misma estación se vuelve de gran interés.

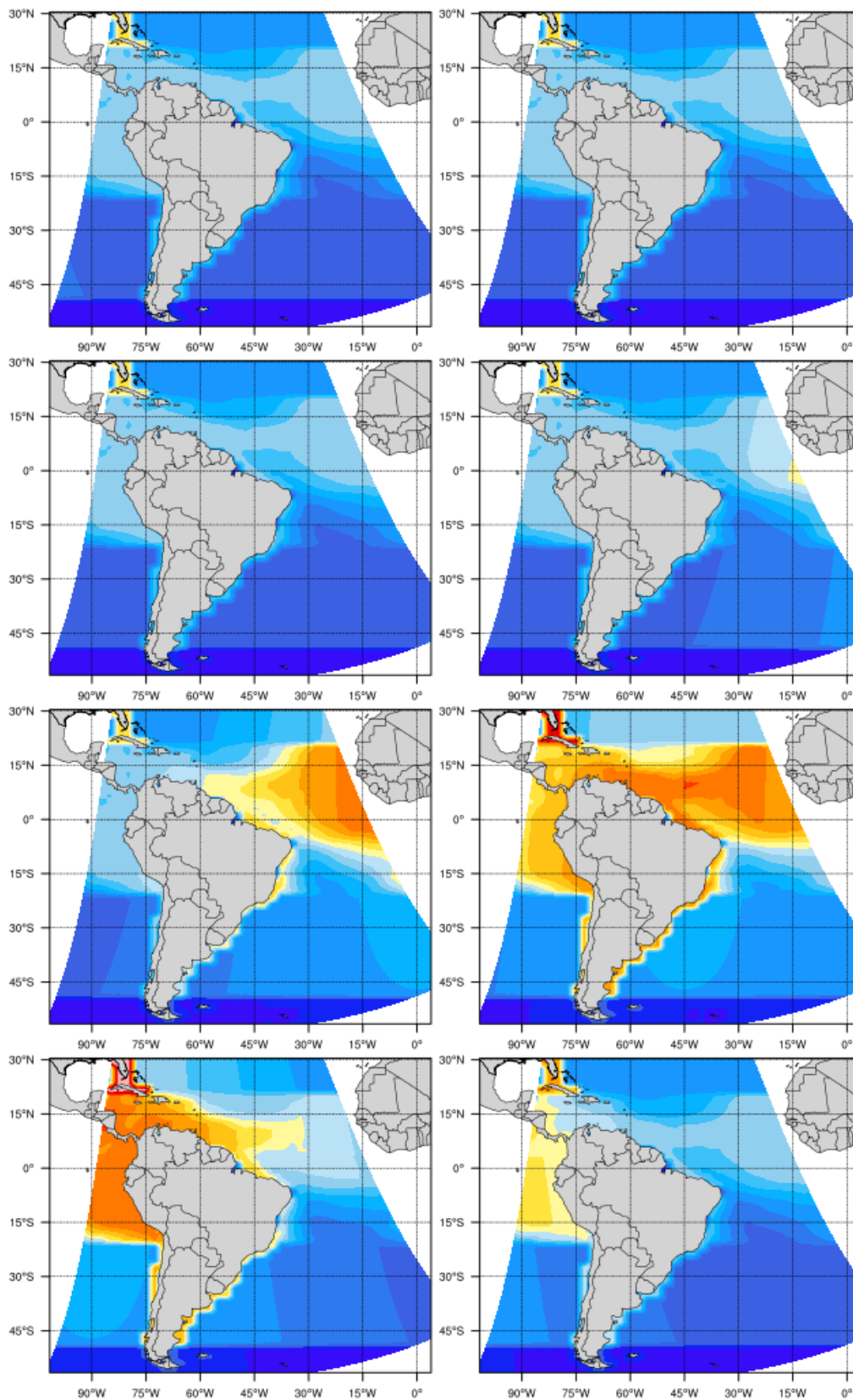


Figura 21. Panel de emisiones de Isopreno (Noche + SZA), cada tres horas de un día de verano.

La **Tabla 5** muestra los valores Máximos y Mínimos de emisión diaria obtenidos para cada uno de los perfiles temporales impuestos. Además, dichos valores se ven reflejados en el Diagrama de barras que se presenta en la **Figura 22**.

Tabla 5. Factor temporal asignado a la emisión horaria para la obtención del Perfil Temporal Urbano.

	VERANO		INVIERNO	
	MÁXIMO	MÍNIMO	MÁXIMO	MÍNIMO
Alfa-pineno	1.12e07	0.00	1.84e07	0.00
Alfa-pineno SZA	7.76e06	5.43e06	8.70e06	6.09e06
Isopreno	2.75e07	0.00	4.41e07	0.00
Isopreno SZA	2.57e07	0.00	1.98e07	0.00
Isopreno Noche	1.00e07	5.43e06	1.12e07	6.09e06
Isopreno (Noche + SZA)	9.39e06	5.08e06	9.18e06	4.95e06

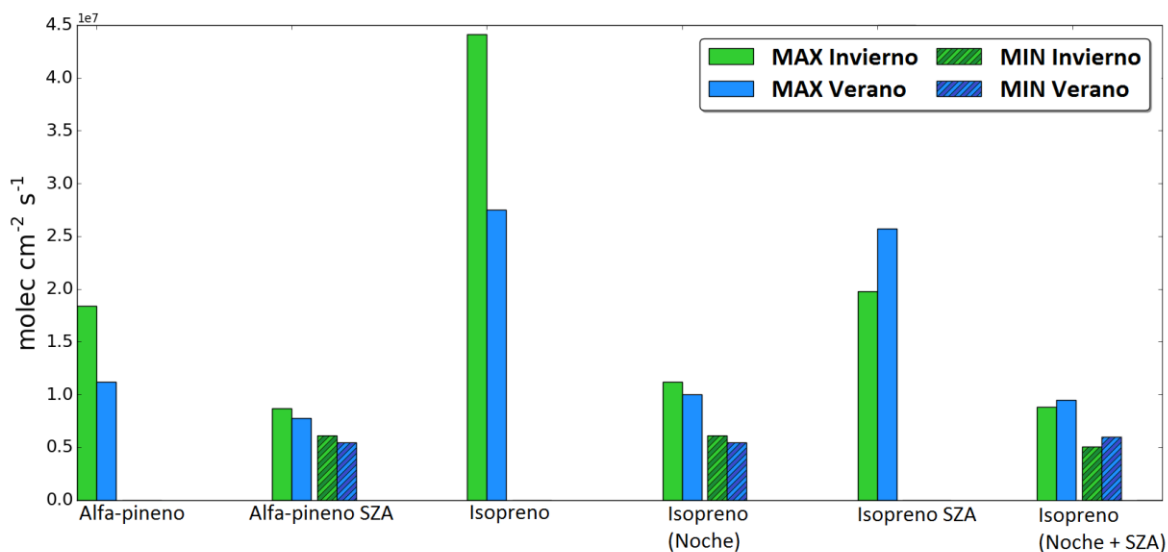


Figura 22. Comparación gráfica entre los valores mostrados en la Tabla 5 para emisiones naturales oceánicas.

Analizando la Figura 22 obtenida a partir de la Tabla 5, vemos que la inclusión del factor dependiente del SZA reduce de manera sustancial el valor máximo de las emisiones en invierno. Por ejemplo, el Isopreno reduce su máximo en un 55.1%, mientras que el Alfa-pineno un 52.7%. Lo importante de este factor es que, como se esperaba, no afecta en igual magnitud a los máximos

en verano, que se reducen en un 30.7% en el Alfa-pineno, mientras que el Isopreno disminuye su valor máximo sólo en un 6.5%.

Puede observarse también que cuando se incluyen tanto el factor dependiente del SZA como la emisión nocturna no nula (Isopreno Noche +SZA), se obtienen máximos y mínimos mayores en verano que en invierno, resultado que posiblemente más se acerque al comportamiento fenomenológico.

ii. REESTRUCTURACIÓN DE INVENTARIOS DE EMISIONES ANTROPOGÉNICAS

a. REDIMENSIONAMIENTO ESPACIAL

Las **Figura 23****Figura 24****Figura 25** muestran los resultados obtenidos al redimensionar espacialmente el inventario de emisión de gases contaminantes y de efecto invernadero de la base de datos EDGAR v4.2 (EDGAR, 2011), para campos de emisión vehicular (sector 1A3b) de CO₂ en Argentina. La base de datos original posee una resolución espacial de 0.1° x 0.1°. Es importante recordar que, para obtener las emisiones de un país en particular, se utilizó la variable denominada POLIT_MAP, desarrollada para asignar un índice numérico a cada país. Su utilización permite seleccionar el territorio deseado para el análisis (en este caso Argentina) por medio de su índice y sólo se consideran las emisiones producidas en ese territorio. El desarrollo de esta variable se incluyó en la herramienta WPS del sistema de modelado WRF-Chem. Al utilizar la herramienta de redimensionamiento sobre el inventario mencionado, se logró obtener mapas de distribución espacial para tres dominios anidados, con resoluciones espaciales de 36 x 36 km², 12 x 12 km² y 4 x 4 km² (ver Capítulo 3).

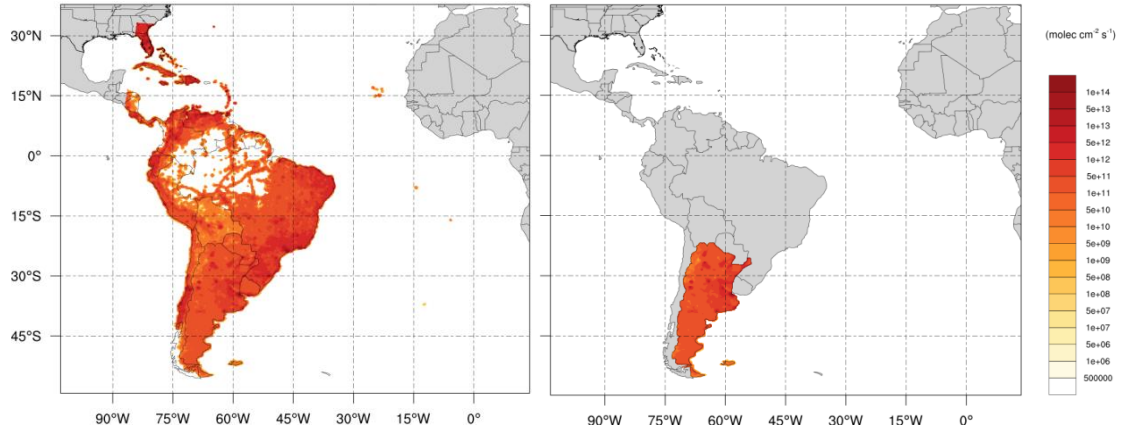


Figura 23. Selección del territorio correspondiente a Argentina mediante la variable POLIT-MAP en el dominio D01.

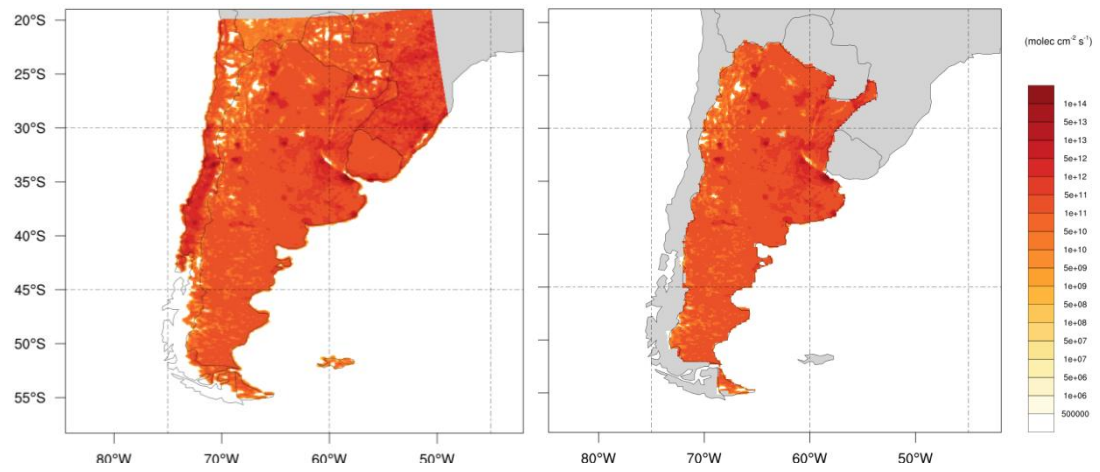


Figura 24. Selección del territorio correspondiente a Argentina mediante la variable POLIT-MAP en el dominio D02.

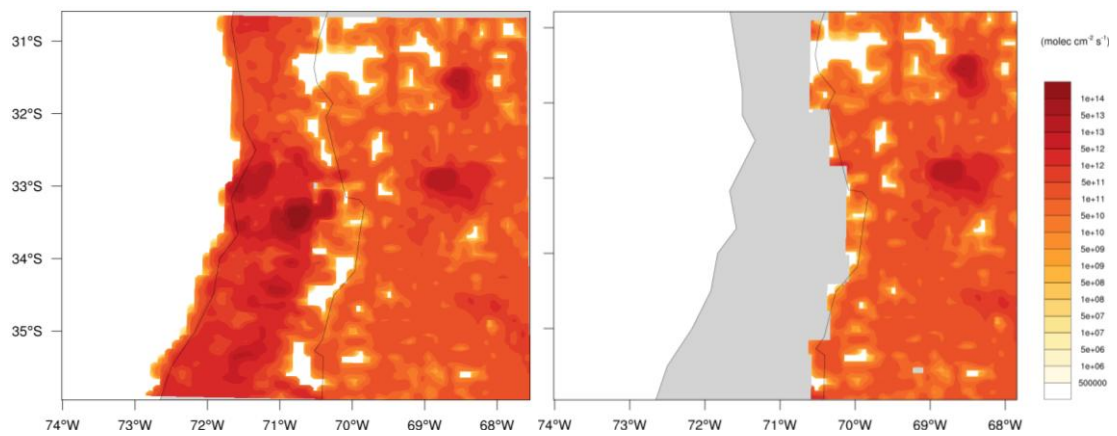


Figura 25. Selección del territorio correspondiente a Argentina mediante la variable POLIT-MAP en el dominio D03.

Posteriormente se realizó un proceso similar, pero ahora tomando como fuente la base de emisiones generada por el grupo GEAA para emisiones de CO₂ vehicular dentro del territorio argentino. Sabiendo que el inventario original tiene una resolución espacial de 2,5x2,5 km², y con la finalidad de realizar análisis comparativos con el inventario redimensionado de EDGAR, se obtuvieron mapas dentro de los mismos dominios D01, D02 y D03. Cabe destacar que la herramienta fue desarrollada para interpolar valores si el inventario original tiene una menor resolución que la pretendida, o bien promediar los valores de emisión presentes si hay más de uno en cada elemento de grilla (es decir, si el inventario base posee una mayor resolución espacial que la requerida).

Los resultados obtenidos al realizar el redimensionamiento sobre el inventario de emisiones vehiculares de CO₂ de la base de datos proporcionada por GEAA para los tres dominios trabajados con resoluciones espaciales de 36x36km², 12x12km² y 4x4 km², se muestran en las **Figura 26, Figura 27, Figura 28**, respectivamente.

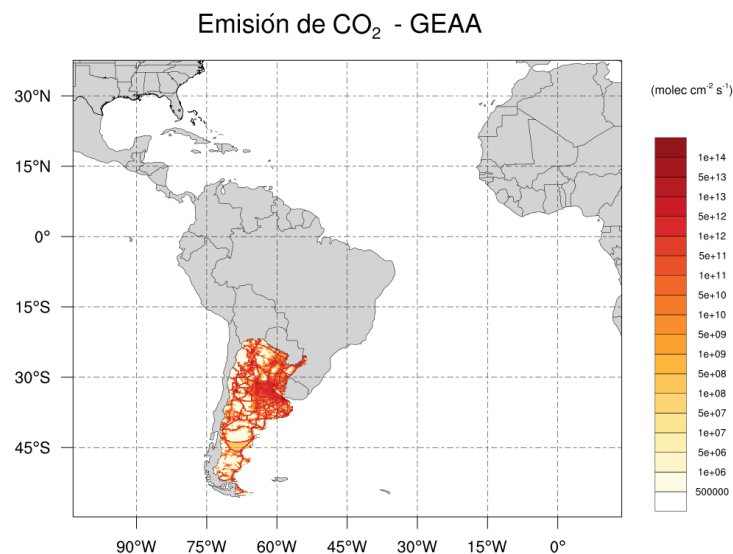


Figura 26. Emisiones vehiculares de CO₂ (GEAA) para Argentina con resolución de 36 x 36 km².

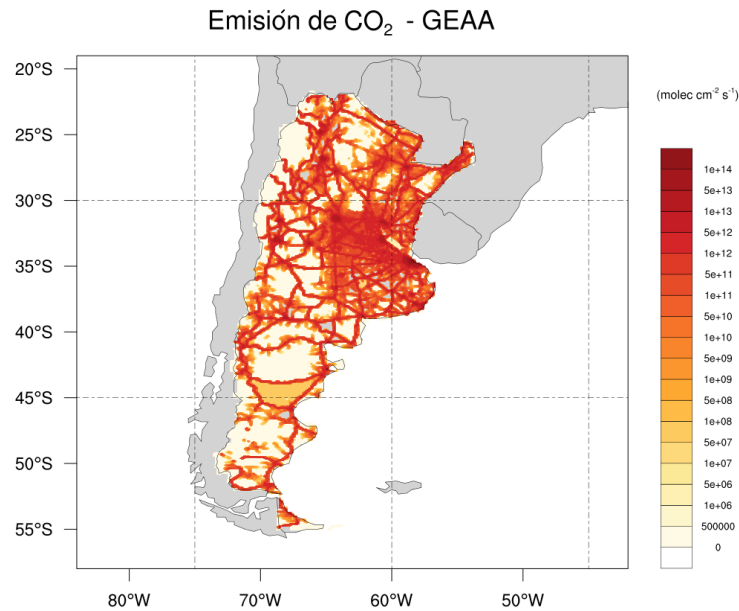


Figura 27. Emisiones vehiculares de CO₂ (GEAA) para Argentina con resolución de 12 x 12 km².

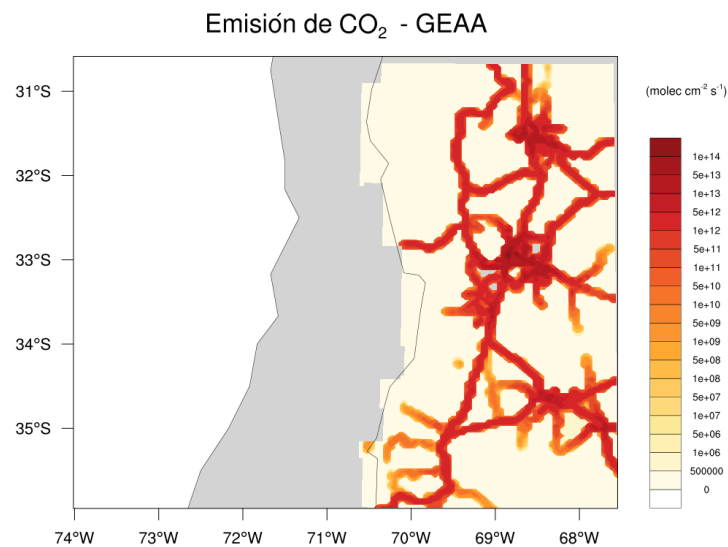


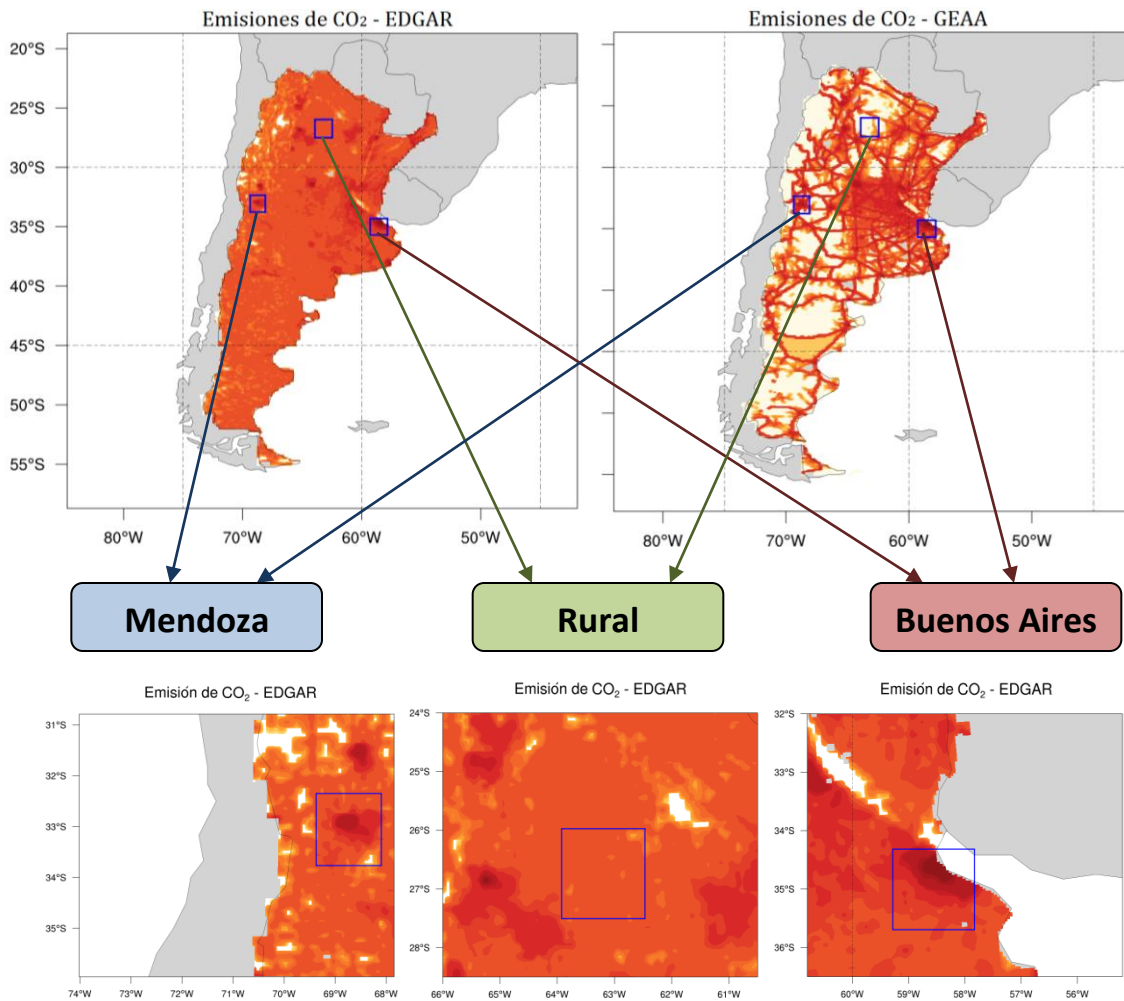
Figura 28. Emisiones vehiculares de CO₂ (GEAA) para Argentina con resolución de 4 x 4 km².

Si se realiza una comparación preliminar cualitativa a partir de la observación de los mapas obtenidos, puede notarse claramente una mejora en la resolución de rutas, caminos y principales ciudades de la Argentina por parte del inventario de GEAA, imperceptibles en el inventario de EDGAR. Previo al análisis realizado sobre los tres sectores de emisión mencionados, se computó el valor de emisión total de CO₂ vehicular dentro del territorio argentino para ambas bases de datos a partir de los inventarios obtenidos. De esta manera se halló que la emisión total era de 45392

Gg/año para el inventario de GEAA, y 37896 Gg/año para EDGAR, valores muy similares a los publicados por Puliafito, Allende y Castesana (2017) (48581 Gg/año para el inventario de GEAA, y 36399 Gg/año para EDGAR).

A la hora de realizar la comparación entre los inventarios redimensionados espacialmente, se seleccionaron tres sectores diferentes basados en la densidad poblacional, uno centrado en una zona rural con baja densidad poblacional (Rural), otro en una zona urbana con mediana densidad poblacional y mezcla de terrenos urbanos, cultivados y sin cultivar (Mendoza), y el tercero en una zona urbana con elevada densidad poblacional e inexistencia de terrenos agrícolas/vírgenes (Buenos Aires). Los sectores seleccionados se encuentran resaltados en los recuadros azules de la

Figura 29.



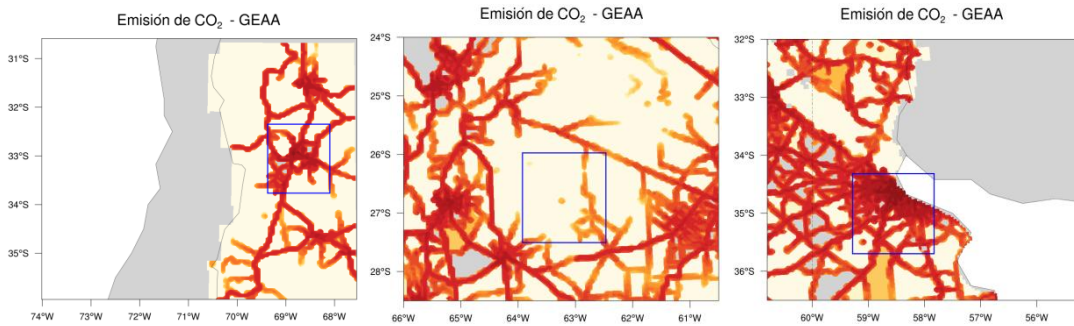


Figura 29. Emisiones de CO₂ para las bases de datos redimensionadas de GEAA (izquierda) y EDGAR (derecha). Los recuadros azules resaltan los diferentes sectores sobre los que se realizó la estadística comparativa.

A continuación se presenta un análisis estadístico de los resultados obtenidos en cada sector seleccionado. El primero de ellos se encuentra centrado en una Zona Rural (Sector Rural, **Tabla 6**), otro en una Ciudad de tamaño intermedio (Sector Mendoza, **Tabla 7**), y el tercero en una Megaciudad (Sector Buenos Aires, **Tabla 8**). En cada uno de estos sectores se consideraron los valores de emisión de los tres inventarios con resoluciones espaciales diferentes. Nótese que los valores máximo (MAX), mínimo (MIN) y la desviación estándar (ST DEV) están medidos en $molec.cm^{-2}.s^{-1}$, mientras que los valores promedio (AVG) y la suma total (TOTAL) tienen unidades de $kg.día^{-1}$.

SECTOR RURAL

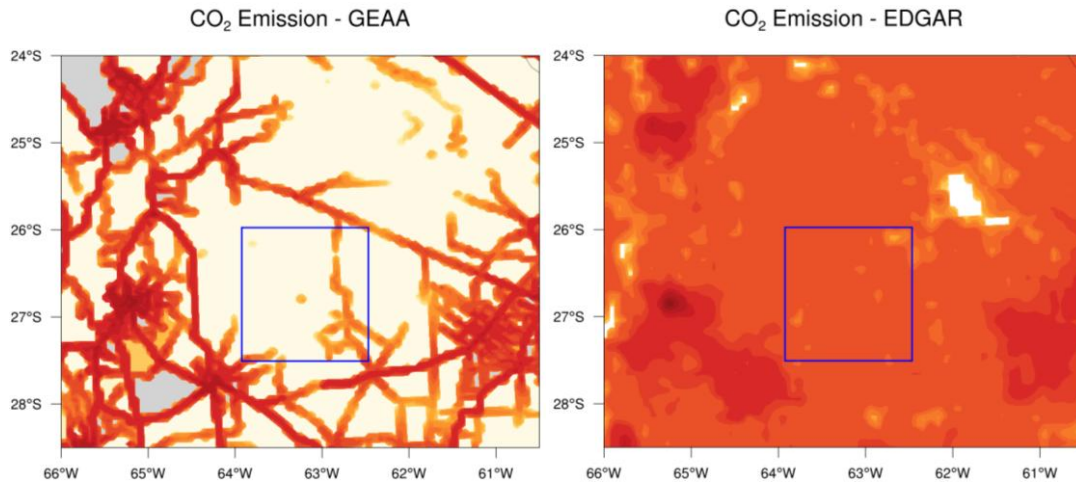


Tabla 6. Valores Máximo, Mínimo, Desviación Estándar, Promedio y Total para las emisiones de CO₂ en el sector Rural, obtenidas de los inventarios redimensionados de GEAA y EDGAR.

RURAL D01

	GEAA	EDGAR
MAX	1,57e+010	2,83e+011
MIN	0,00e+000	1,80e+011
ST DEV	4,53e+009	3,31e+010
AVG	7,35e+003	8,29e+005
TOTAL	8,82e+004	9,95e+006

RURAL D02

	GEAA	EDGAR
MAX	2,70e+010	3,90e+011
MIN	0,00e+000	3,96e+009
ST DEV	3,23e+009	7,10e+010
AVG	4,26e+002	9,02e+004
TOTAL	5,11e+004	1,08e+007

RURAL D03

	GEAA	EDGAR
MAX	4,05e+011	4,46e+011
MIN	0,00e+000	8,57e+008
ST DEV	1,67e+010	7,64e+010
AVG	8,09e+001	9,94e+003
TOTAL	9,55e+004	1,17e+007

SECTOR MENDOZA

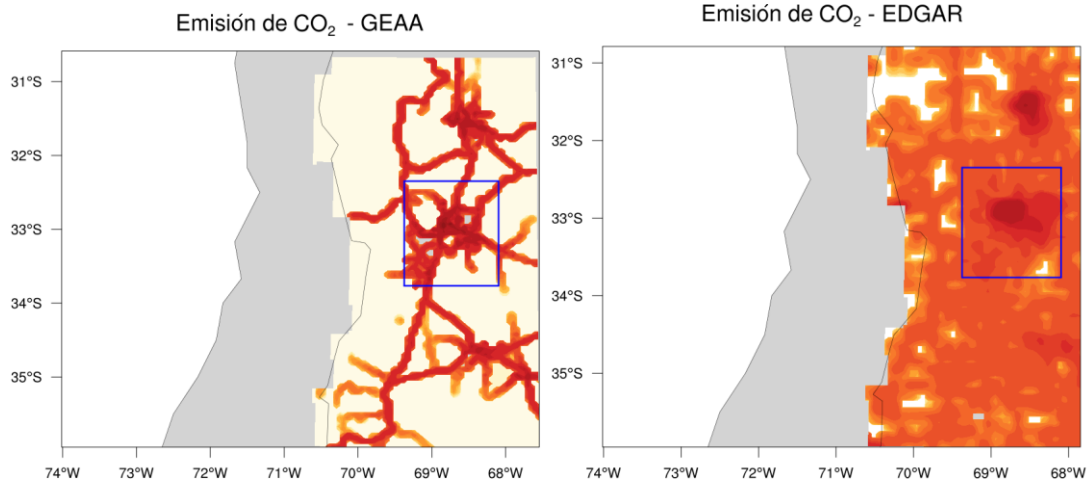


Tabla 7. Valores Máximo, Mínimo, Desviación Estándar, Promedio y Total para las emisiones de CO₂ en el sector Mendoza, obtenidas de los inventarios redimensionados de GEAA y EDGAR.

MENDOZA D01

	GEAA	EDGAR
MAX	2,21e+013	1,88e+013
MIN	5,30e+010	8,25e+010
ST DEV	6,19e+012	5,25e+012
AVG	1,29e+007	8,81e+006
TOTAL	1,55e+008	1,06e+008

MENDOZA D02

	GEAA	EDGAR
MAX	5,97e+013	3,96e+013
MIN	0,00e+000	0,00e+000
ST DEV	8,33e+012	6,63e+012
AVG	1,44e+006	9,78e+005
TOTAL	1,55e+008	1,06e+008

MENDOZA D03

	GEAA	EDGAR
MAX	1,58e+014	4,96e+013
MIN	0,00e+000	0,00e+000
ST DEV	1,20e+013	6,65e+012
AVG	1,51e+005	1,03e+005
TOTAL	1,57e+008	1,07e+008

SECTOR BUENOS AIRES

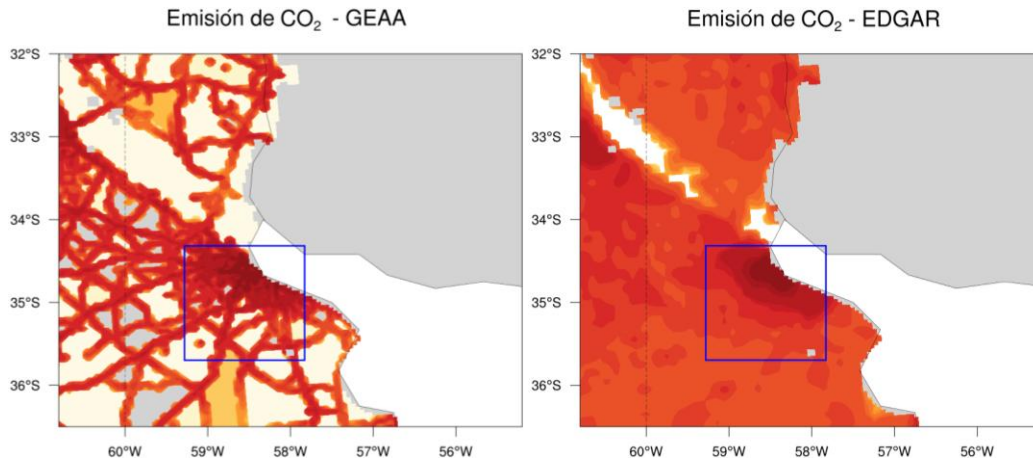


Tabla 8. Valores Máximo, Mínimo, Desviación Estándar, Promedio y Total para las emisiones de CO₂ en el sector Buenos Aires, obtenidas de los inventarios redimensionados de GEAA y EDGAR.

BUENOS AIRES D01

	GEAA	EDGAR
MAX	1,22e+014	1,95e+014
MIN	4,79e+011	5,58e+011
ST DEV	3,22e+013	5,12e+013
AVG	6,51e+007	7,77e+007
TOTAL	9,12e+008	1,09e+009

BUENOS AIRES D02

	GEAA	EDGAR
MAX	2,18e+014	4,63e+014
MIN	0,00e+000	2,77e+011
ST DEV	3,91e+013	6,81e+013
AVG	7,92e+006	1,03e+007
TOTAL	9,19e+008	1,05e+009

BUENOS AIRES D03

	GEAA	EDGAR
MAX	5,20e+014	5,55e+014
MIN	0,00e+000	0,00e+000
ST DEV	5,39e+013	6,80e+013
AVG	8,73e+005	1,16e+006
TOTAL	9,28e+008	1,08e+009

En cada uno de los tres sectores estudiados puede observarse claramente que aumentar la resolución espacial proporciona valores Máximos y Mínimos distintos, asociado a una mejor redistribución de las fuentes de emisión, que en este caso son principalmente las carreteras que atraviesan un dado sector. Puede comprobarse que al tomar un tamaño de grilla menor, la ubicación espacial de ciudades, rutas y caminos mejora notoriamente, lo que resulta crucial para el análisis de emisiones contaminantes, normalmente generadas en lugares específicos y de dimensiones reducidas como son las emisiones vehiculares. En particular en Buenos Aires, el valor máximo del dominio D03 es 2,4 veces mayor que en el dominio D02 para GEAA, mientras que en EDGAR es sólo 1,2 veces mayor. El comportamiento en Mendoza es muy similar al encontrado en Buenos Aires, ya que la relación entre los valores máximos de los dominios D03 y D02 es de 2,65 para GEAA y 1,25 para EDGAR.

La mayor diferencia en los valores máximos aparece al analizar el Sector Rural (**Tabla 6**). Allí, en el dominio D01, el valor máximo de EDGAR llega a ser 18 veces mayor que el de GEAA, pero al mejorar la resolución los máximos para ambos inventarios comienzan a acercarse hasta hacerse prácticamente iguales en el dominio D03.

Al analizar los valores Totales de emisión para cada una de los inventarios por separado, se nota que no aparecen cambios sustanciales al mejorar la resolución espacial. Puede considerarse entonces que el redimensionamiento espacial, sea por interpolación de los valores de emisión en cada punto de grilla (como el realizado para la base EDGAR), o bien al realizar el promedio de los mismos (al utilizar GEAA), no altera el valor total de emisión inicial informado en cada inventario de emisión de partida. Sin embargo, nuevamente aparecen las diferencias sustanciales al comparar los inventarios entre sí para el Sector Rural. Allí, el inventario de EDGAR supera hasta 200 veces el valor total de emisión con respecto a GEAA. En ciudades de tamaño intermedio, como Mendoza, el valor total de emisión de GEAA supera hasta en un 47% al de EDGAR, compensando lo ocurrido en sectores rurales, mientras que en megaciudades como Buenos Aires es donde menores diferencias aparecen entre los valores totales de los inventarios.

De particular interés entre las variables estadísticas es el valor Mínimo encontrado en cada sector. Si bien esta cifra en sí no repercute en la cuantificación total de las emisiones de cada inventario obtenido, permite reconocer casos en los cuales el área de cada elemento de grilla está muy por encima del tamaño recomendable para estudiar un sector de dimensiones acotadas. A modo de ejemplo puede observarse que tanto para el Sector Mendoza como para el Sector

Buenos Aires, al trabajar con el dominio D01 (cuya resolución espacial es de 36 x 36 km²), el valor mínimo de emisión es distinto de cero, algo que es erróneo y se comprueba al observar los resultados para resoluciones más altas (D02 y D03). La comparación entre los valores máximos y totales de emisión de CO₂ para los inventarios GEAA y EDGAR en los tres sectores analizados, por medio de un diagrama de barras basado en los datos presentados en las Tablas **Tabla 6** **Tabla 7** **Tabla 8** se muestra en las **Figura 30** **Figura 31**.

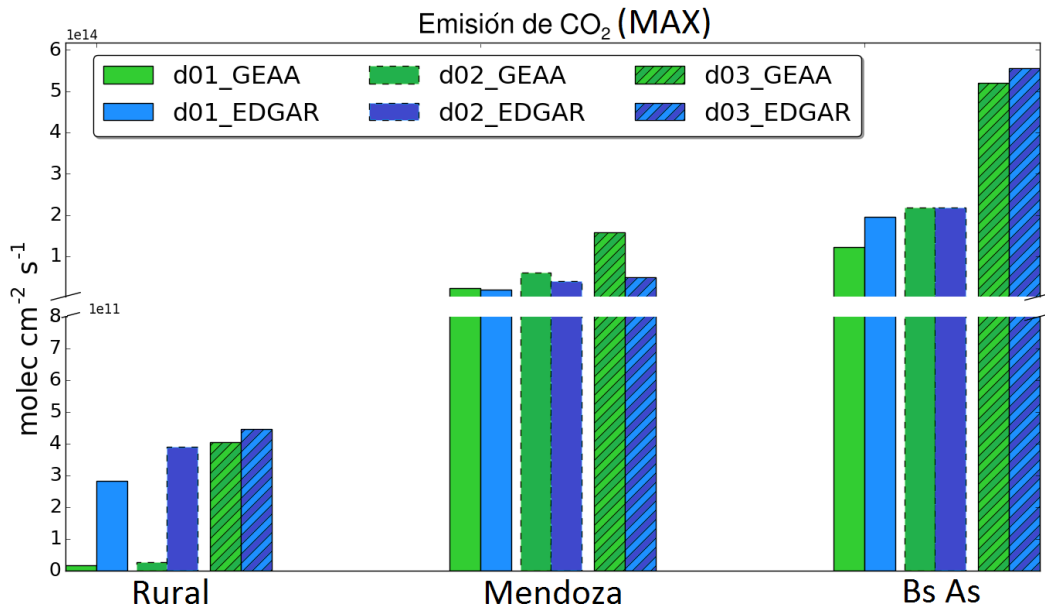


Figura 30. Comparación estadística de los valores Máximos de emisión de CO₂ para las tres zonas geográficas presentadas, de acuerdo a diferentes niveles de resolución.

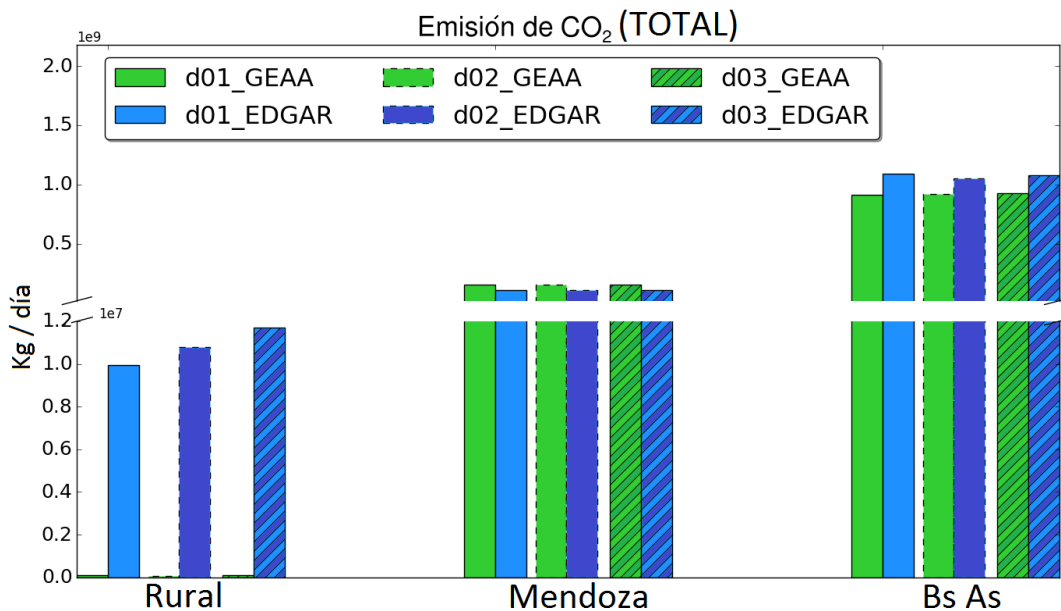


Figura 31. Comparación estadística de los valores Totales de emisión de CO₂ para las tres zonas geográficas presentadas, de acuerdo a diferentes niveles de resolución.

b. REDIMENSIONAMIENTO TEMPORAL

La aplicación de la variable TIME_ZONE agregada al WPS permite obtener el perfil temporal que se haya impuesto, asociado a la hora local correspondiente a cada punto de grilla. En la Figura 32 se muestran cuatro perfiles temporales diarios idénticos de emisiones vehiculares para el inventario EDGAR, cada uno aplicado a zonas con diferentes husos horarios. Los puntos fueron seleccionados de manera tal que la emisión total en dicha celda fueran equivalentes. Además, se muestra el valor de emisión constante que mantiene el mismo valor de emisión total diaria.

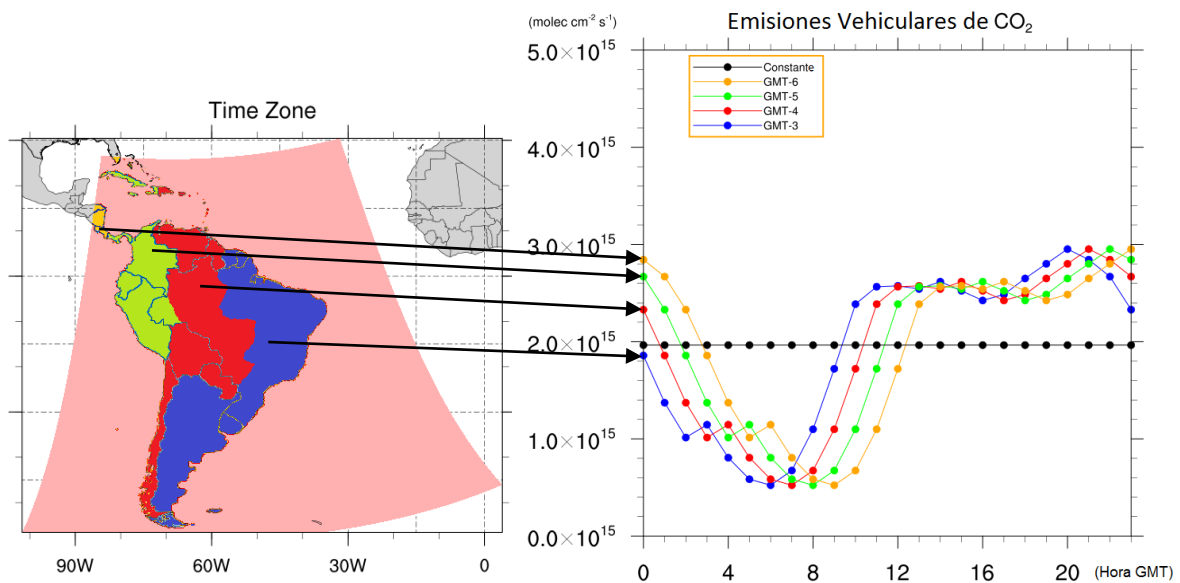


Figura 32. Perfiles temporales vehiculares idénticos asociados a diferentes husos horarios.

En cuanto a las emisiones vehiculares para Argentina, se observa que todo el territorio tiene el mismo huso horario, por lo que el perfil temporal asociado (en este caso a las emisiones vehiculares de CO₂) se aplica por igual para cada punto de grilla. Sin embargo, los inventarios de emisión obtenidos luego del redimensionamiento temporal permiten considerar dos perfiles antropogénicos vehiculares, uno representativo del comportamiento vehicular en zonas urbanas y otro asociado a zonas rurales. Pueden observarse las curvas que representan los perfiles temporales en zonas urbanas y rurales en la Figura 33, donde nuevamente se seleccionaron puntos con emisiones diarias totales equivalentes, con su correspondiente perfil de emisión constante.

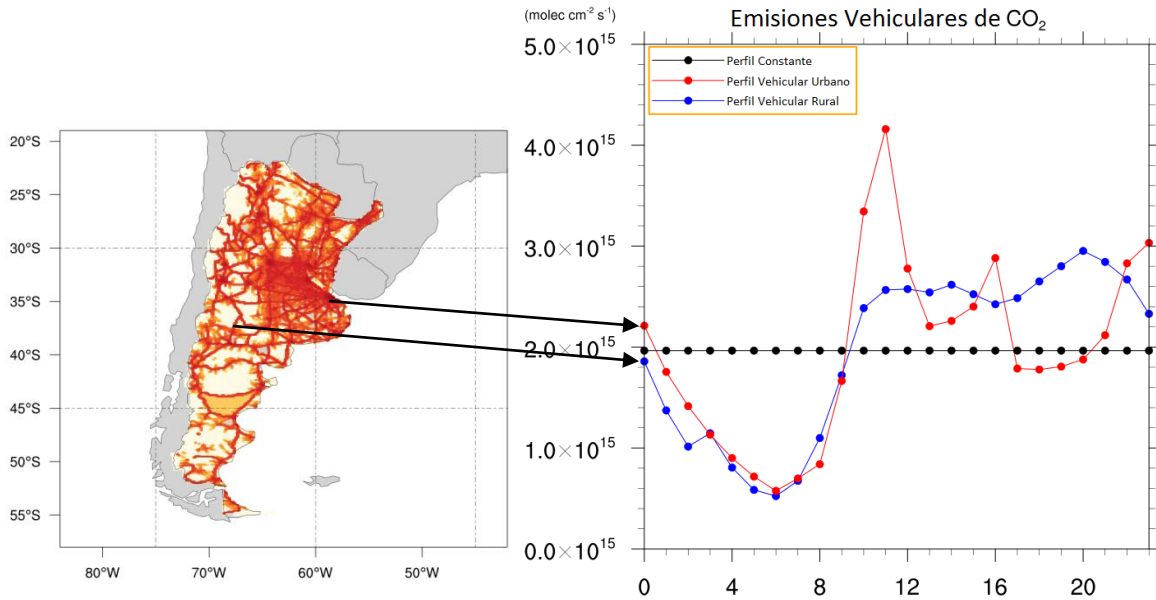


Figura 33. La herramienta de pre-procesamiento permite la inclusión de diversos perfiles temporales asociados a diferentes comportamientos vehiculares.

Al imponer los dos perfiles temporales en el mismo punto, es decir, sobre el mismo valor de emisión constante, se observa que el valor de emisión total se encuentra normalizado correctamente (el área bajo cada una de las tres curvas es igual, y representa a la emisión total generada en ese tiempo).

Se aprecia que la herramienta de redimensionamiento considera de manera acertada los perfiles temporales impuestos en forma discreta, tomando el factor multiplicativo asociado a cada hora del día por separado. Si bien se muestran solamente dos perfiles temporales con esta característica, es importante destacar la facilidad con la que puede modificarse el código para introducir otros perfiles temporales, determinados por el usuario. La única condición que debe cumplir un perfil temporal que quiera agregarse es contar con un valor por cada hora del día, y que los mismos estén normalizados, es decir que la suma de los 24 valores diarios sea igual a 1.

5. CONCLUSIONES

La herramienta de redimensionamiento espacial y temporal implementada es capaz de reestructurar tanto inventarios globales como locales, a fin de generar emisiones de escala regional de acuerdo a los requerimientos técnicos del modelo WRF-Chem. La posibilidad de tomar inventarios con mayor o menor resolución espacial que la deseada luego del procesamiento, permite no sólo tener una amplia gama de posibilidades a la hora de seleccionar las bases de datos a utilizarse, sino que también da lugar al análisis conjunto de inventarios inicialmente incomparables, o con diferentes requerimientos técnicos.

A la hora de analizar las emisiones oceánicas de especies VSL a partir de la base de datos de CAM-Chem, la implementación de la herramienta de redimensionamiento espacial generó una marcada mejoría en su resolución, y pudo analizarse a menor escala el factor de emisión de costa, comprobándose que el valor del mismo era de 2,5 veces mayor que el valor en el océano lejano a la costa. Además, pudo observarse cómo este se manifiesta en latitudes donde la emisión en mar abierto es considerada constante. El hecho de que al incrementar la resolución es posible definir una mayor cantidad de puntos, permitió encontrar lugares donde el máximo de emisión no coincidía con el mapa continental implementado, algo absolutamente imperceptible con la resolución espacial original del inventario global. Como trabajo a futuro resta aplicar una función del factor de costa que dependa de la distancia al continente, y no solo que aparezca como un parámetro intrínseco a los puntos de grilla costeros.

Al conseguir graficar las emisiones cada cierta cantidad de horas en un día en todo el dominio, como puede verse en el panel de la **Figura 21**, se observa claramente el comportamiento de los perfiles temporales impuestos, ya que se distingue claramente que la emisión toma valores máximos al mediodía y mínimos en las horas nocturnas. Además, dependiendo del perfil temporal impuesto, aparecen con claridad las diferencias en cuanto a los factores de emisión nocturna, Ángulo Cenital Solar, etcétera.

Para el caso de emisiones antropogénicas, se trabajó con bases de datos de emisiones de CO₂ vehicular con diferentes características y resolución. De esta manera pudo realizarse un exhaustivo estudio comparativo entre las bases de datos de EDGAR (normalmente utilizada por la comunidad científica internacional) y GEAA (desarrollada exclusivamente para Argentina), y así

determinar el grado de exactitud y confiabilidad de cada una de éstas bases en determinados sectores del territorio nacional. Se diferenciaron tres zonas por la diversidad de su comportamiento vehicular, y se concluyó que, si bien en ciudades grandes ambas bases de datos representan valores totales de emisión similares, en zonas rurales la base EDGAR sobreestima cuantiosamente los valores de emisión total respecto al inventario GEAA. Esto puede deberse a la baja resolución que tiene dicha base de datos en aquellos sectores donde una ruta o camino concentra la mayor cantidad de la emisión, y en sus alrededores la misma disminuye a cero. Es en esos casos justamente donde tomar un valor promedio de emisión genera los mayores errores de estimación. También es en esos sectores donde la diferencia entre los valores máximos para las bases de EDGAR y GEAA es más notoria. Contrariamente a lo que sucede en zonas rurales, la base EDGAR subestima los valores totales de emisión para ciudades de tamaño intermedio con respecto a la base GEAA.

Aún cuando parezca trivial, resultó de gran importancia la corrección del área superficial real de cada grilla en relación a las grillas equiespaciadas en latitud. Debido a que se utilizan coordenadas esféricas, y que el área delimitada por dos determinadas longitudes es cada vez menor al acercarse a los polos (es decir, las líneas imaginarias definidas por dos longitudes se encuentran cada vez más cercanas entre sí), fue imperioso recalcular el valor de emisión por unidad de área en cada punto de grilla en base al área superficial donde se medía.

Se evidencia también el aporte significativo de realizar el pre-procesamiento mediante un enfoque interdisciplinar pues, con la inclusión de comportamientos o dinámicas geoespaciales y estacionales en los diferentes análisis se pudo obtener una representación más realista de los procesos naturales y antropogénicos de generación de emisiones. En particular, se encontró que para fuentes naturales dependientes de la radiación solar (como CHBr_3), un perfil de emisión ponderado por el coseno del Ángulo Cenital permite una mejor representación de la eficiencia de los procesos biogeoquímicos dependientes de la estación del año analizada.

La herramienta de redimensionamiento permite asociar perfiles temporales diarios a cada especie que se esté estudiando, por lo que es posible diferenciar las mismas no sólo en su magnitud total diaria sino en las distintas horas del día, para de esta manera lograr modelar etapas de procesos atmosféricos en particular. Así, las especies cuya emisión depende, por ejemplo, de factores como la radiación solar incidente, pueden diferenciarse de las que tienen otro tipo de comportamiento.

Al tener la posibilidad de distinguir zonas con distintos perfiles de emisión para una misma especie, como puede ser la emisión de CO₂ vehicular en ciudades o zonas rurales, la herramienta presentada permite asignar diversos perfiles temporales para cada una de ellas. Por último, pueden también diferenciarse los sectores de emisión para una misma especie. Al considerar que un compuesto puede generarse a partir de diversas fuentes o sectores de emisión (por ejemplo, la emisión de CO₂ puede provenir de fuentes vehiculares, industriales, agroindustriales, etc), la selección de un perfil temporal asociado a cada sector admite nuevas perspectivas en el estudio de procesos emisivos complejos en una determinada región.

Finalmente, la inclusión del huso horario correspondiente a cada punto de grilla permite asociar de manera correcta los distintos perfiles diurnos de actividades socio-económicas de cada región, y a su vez da la posibilidad de analizar dominios más extensos, respetando el desfase de la hora local respecto a la hora GMT de los países afectados.

Es necesario recalcar la importancia del desarrollo de la herramienta de redimensionamiento presentada, que permite reestructurar espacial y temporalmente cualquier tipo de inventario que cumpla con ciertas condiciones, y cuyos resultados puedan ser tan fácilmente modificables por el usuario. Con su desarrollo y utilización no solamente se salvan problemas como la dificultad de contar con inventarios de emisión en formato compatible con WRF-Chem, sino que también permite que el modelo interprete las variables nuevas y modificaciones realizadas sobre los mismos.

Contar con códigos computacionales de este tipo no sólo mejora sustancialmente el resultado de trabajos e investigaciones ya en proceso, sino que también abre una amplia gama de posibilidades para nuevos enfoques y estudios, tanto a nivel nacional como global. En particular, contar con una nueva herramienta técnica posiciona al grupo de Meteorología, Química Atmosférica y Clima de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FCEN) en condiciones privilegiadas para realizar el estudio de la química atmosférica a escala regional en Sudamérica.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Andrade-Flores, M. et al. (2016) 'Fostering a collaborative atmospheric chemistry research community in the Latin America and Caribbean region', *Bulletin of the American Meteorological Society*, 97(10), pp. 1929–1939. doi: 10.1175/BAMS-D-14-00267.1.
- Andrade, M. de F. et al. (2015) 'Air quality forecasting system for Southeastern Brazil', *Frontiers in Environmental Science*, 3(February), pp. 1–14. doi: 10.3389/fenvs.2015.00009.
- Andreae, M. et al. (2012) 'Carbon monoxide and related trace gases and aerosols over the Amazon Basin during the wet and dry seasons', *pubman.mpdl.mpg.de*.
- ArcGIS Explorer - Proyecciones del mapa (2017) , <http://webhelp.esri.com/>.
- Carpenter, L. J. et al. (2014) 'Update on Ozone-Depleting Substances (ODSs) and Other Gases of Interest to the Montreal Protocol'. World Meteorological Organization, p. 1.1-1.101.
- Carpenter, L. J., Jones, C. and Dunk, R. (2009) 'Air-sea fluxes of biogenic bromine from the tropical and North Atlantic Ocean', *atmos-chem-phys.net*.
- Castro, F., Allende, D. and Puliafito, E. (2009) 'Influencia de la resolución de grilla en el modelado de emisiones vehiculares', *Mecánica Computacional (MECOM)*, XXVIII, pp. 3–6.
- CESM | Community Earth System Model Web Page (2018) , <http://www.cesm.ucar.edu/>.
- CISL's NCAR Command Language (NCL) Web Page (2017) The NCAR Command Language (Version 6.4.0) [Software]. (2017). Boulder, Colorado: UCAR/NCAR/CISL/TDD. <http://dx.doi.org/10.5065/D6WD3XH5>.
- EDGAR (2011) 'Global Emissions EDGAR v4. 2', <http://edgar.jrc.ec.europa.eu/>.
- EDGAR Web Page (2018) , <http://edgar.jrc.ec.europa.eu/>.
- Emmons, L. K. et al. (2010) 'Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4)'.
- Fernandez, R. P. et al. (2010) 'Modelado regional de la calidad de aire utilizando el modelo WRF/Chem: Implementación de datos globales y locales para Mendoza', *Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente*, 14, pp. 43–50.
- Fernandez, R. P., Salawitch, R. J., et al. (2014) 'Bromine partitioning in the tropical tropopause layer: implications for stratospheric injection', *Atmospheric Chemistry and Physics*. Copernicus GmbH, 14(24), pp. 13391–13410. doi: 10.5194/acp-14-13391-2014.
- Fernandez, R. P., Cremades, P., et al. (2014) 'Regional modeling of the land / ocean-atmosphere interaction using WRF-Chem: implementation of high resolution surface emissions', 13th Quadrennial ICACGP Symposium and 13th IGAC Science Conference on Atmospheric Chemistry.
- Fernandez, R. P. et al. (2017) 'Impact of biogenic very short-lived bromine on the Antarctic ozone hole during the 21st century', *Atmospheric Chemistry and Physics*, 17(3), pp. 1673–1688. doi: 10.5194/acp-17-1673-2017.
- Fernandez, R. P. and Puliafito, E. (2010) 'Modelado de la distribución espacio-temporal de la concentración de O₃ troposférico: relación entre la química atmosférica y la meteorología', XXVIII Congreso Argentino de Química (AQA), Lanús.

- Freitas, S. et al. (2010) 'A pre-processor of trace gases and aerosols emission fields for regional and global atmospheric chemistry models', *search.proquest.com*, pp. 855–888. doi: 10.5194/gmdd-3-855-2010.
- Georgiou, G. K. et al. (2018) 'Air quality modelling in the summer over the eastern Mediterranean using WRF-Chem: chemistry and aerosol mechanism intercomparison', *Atmospheric Chemistry and Physics*, 18(3), pp. 1555–1571. doi: 10.5194/acp-18-1555-2018.
- Gómez Martín, J. C. et al. (2013) 'Iodine chemistry in the eastern Pacific marine boundary layer', *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 118(2), pp. 887–904. doi: 10.1002/jgrd.50132.
- Grell, G. et al. (2005) 'Fully coupled "online" chemistry within the WRF model', *Atmospheric Environment*, 39(37), pp. 6957–6975. doi: 10.1016/j.atmosenv.2005.04.027.
- Hodzic, A. and Knote, C. (2014) 'MOZART gas-phase chemistry with MOSAIC aerosols', p. 7.
- Im, U. et al. (2015) 'Evaluation of operational online-coupled regional air quality models over Europe and North America in the context of AQMEII phase 2. Part II: Particulate matter', *Atmospheric Environment*, 115, pp. 421–441. doi: 10.1016/j.atmosenv.2014.08.072.
- Jacobson, M. Z. (2005) *Fundamentals of Atmospheric Modeling*. Atmospheric Science and Meteorology | Cambridge University Press. Cambridge University Press.
- Jiang, F. et al. (2008) 'Numerical modeling of a continuous photochemical pollution episode in Hong Kong using WRF-chem', *Atmospheric Environment*, 42(38), pp. 8717–8727. doi: 10.1016/j.atmosenv.2008.08.034.
- Lamarque, J.-F. et al. (2012) 'CAM-chem: description and evaluation of interactive atmospheric chemistry in the Community Earth System Model', *Geoscientific Model Development*, 5(2), pp. 369–411. doi: 10.5194/gmd-5-369-2012.
- Lee, S.-H., Sung, K.-H. and Lee, H.-W. (2008) 'Impact of regional trans-boundary ozone associated with complex terrain on urban air quality', *Atmospheric Environment*, 42(32), pp. 7384–7396. doi: 10.1016/j.atmosenv.2008.06.027.
- Michalakes, J. G. and McAtee, J. W. (2002) "Software Infrastructure for the Weather Research and Forecast Model", UGC 2002 - June, Austin, Texas, p. 13pp.
- Mulena, G. C. et al. (2016) 'Examining the influence of meteorological simulations forced by different initial and boundary conditions in volcanic ash dispersion modelling', *Atmospheric Research*, 176–177, pp. 29–42. doi: 10.1016/j.atmosres.2016.02.009.
- Muller, H. C. and Cruz, S. (2007) 'Programando en Fortran'.
- NOAA Solar Position Calculator (2017) , <https://www.esrl.noaa.gov/>.
- Ordóñez, C. et al. (2012) 'Bromine and iodine chemistry in a global chemistry-climate model: Description and evaluation of very short-lived oceanic sources', *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12(3), pp. 1423–1447. doi: 10.5194/acp-12-1423-2012.
- Peckham, S. E. et al. (2010) *WRF/Chem Version 3.2 Users Guide*.
- Puliafito, E. (2010) 'Transporte Y Calidad Del Aire Informe N°4: Opciones De Mitigación De Las Emisiones De Carbono Para El Sector Transporte En Argentina', pp. 1–54.
- Puliafito, E. et al. (2011) 'New Approaches for Urban and Regional Air Pollution Modelling and Management', *Advanced Air Pollution*, pp. 429–454. doi: 10.5772/710.

- Puliafito, E. et al. (2015) 'High resolution inventory of GHG emissions of the road transport sector in Argentina', *Atmospheric Environment*, 101, pp. 303–311. doi: 10.1016/j.atmosenv.2014.11.040.
- Puliafito, E., Allende, D. and Castesana, P. (2017) 'High-resolution atmospheric emission inventory of the argentine energy sector. Comparison with edgar global emission database'.
- Quack, B. and Wallace, D. W. R. (2003) 'Air-sea flux of bromoform: Controls, rates, and implications', *Global Biogeochemical Cycles*, 17(1). doi: 10.1029/2002GB001890.
- Saide, P. et al. (2011) 'Forecasting urban PM10 and PM2.5 pollution episodes in very stable nocturnal conditions and complex terrain using WRF–Chem CO tracer model'.
- Saiz-Lopez, A. et al. (2012) 'Estimating the climate significance of halogen-driven ozone loss in the tropical marine troposphere', *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12(9), pp. 3939–3949. doi: 10.5194/acp-12-3939-2012.
- Saiz-Lopez, A. et al. (2014) 'Iodine chemistry in the troposphere and its effect on ozone', *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14(23), pp. 13119–13143. doi: 10.5194/acp-14-13119-2014.
- Salawitch, R. J. et al. (2010) 'A new interpretation of total column BrO during Arctic spring', *Geophysical Research Letters*, 37(21), p. n/a-n/a. doi: 10.1029/2010GL043798.
- Schauffler, S. M. et al. (1993) 'Measurements of halogenated organic compounds near the tropical tropopause', *Geophysical Research Letters*, 20(22), pp. 2567–2570. doi: 10.1029/93GL02840.
- Schürmann, G. J. et al. (2009) 'Modelling local and synoptic scale influences on ozone concentrations in a topographically complex region of Southern Italy', *Atmospheric Environment*, 43(29), pp. 4424–4434. doi: 10.1016/j.atmosenv.2009.06.017.
- Seinfeld, J. and Pandis, S. (2016) *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*.
- Tilmes, S. and Lamarque, J.-F. (2015) 'Description and evaluation of tropospheric chemistry and aerosols in the Community Earth System Model (CESM1.2)', search.proquest.com.
- US EPA, O. (2005) 'National Emissions Inventory (NEI)'.
- Very Short-Lived Substances in the Atmosphere | EurekaAlert! Science News Web Page (2017) , <https://www.eurekaalert.org/>.
- Wang, W. et al. (2009) *Advanced Research WRF (ARW) Version 3.0 User's Guide*.
- 'World Meteorological Organization (WMO)' (2014) *Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2010, Global Ozone Research and Monitoring Project-Report No. 55, Geneva, Switzerland*.
- WRF-Chem Development and Support Team (2017) , <https://ruc.noaa.gov/wrf/wrf-chem/support-team.htm>.
- Ying, Z., Tie, X. and Li, G. (2009) 'Sensitivity of ozone concentrations to diurnal variations of surface emissions in Mexico City: A WRF/Chem modeling study', *Atmospheric Environment*, 43(4), pp. 851–859. doi: 10.1016/j.atmosenv.2008.10.044.
- Zhang, Y. and Wen, X. (2010) 'Simulating chemistry–aerosol–cloud–radiation–climate feedbacks over the continental US using the online-coupled Weather Research Forecasting Model with Chemistry'.