



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO

TESIS DE DOCTORADO

IMPACTO DE LAS EMISIONES NATURALES Y ANTROPOGÉNICAS
SOBRE LA CALIDAD DE AIRE REGIONAL EN ARGENTINA.

Tesista:

Ing. Ana Isabel Lopez-Noreña

Nombre del Director:

Dr. Rafael Fernandez

Nombre del Co-Director:

Dr. Enrique Puliafito

Mendoza, Argentina. 2023



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

TESIS DE DOCTORADO

IMPACTO DE LAS EMISIONES NATURALES Y ANTROPOGÉNICAS
SOBRE LA CALIDAD DE AIRE REGIONAL EN ARGENTINA.

Doctorado en Ciencia y Tecnología

Tesista:

Ing. Ana Isabel Lopez-Noreña

Nombre del Director:

Dr. Rafael Fernandez

Nombre del Co-Director:

Dr. Enrique Puliafito

Mendoza, Argentina. 2023

Agradecimientos

Quisiera expresar mi profundo agradecimiento a todas las personas extraordinarias que me han brindado su apoyo incondicional a lo largo de mi trayectoria académica. Tal como afirmó Walt Disney, los grandes logros de cualquier individuo suelen ser el resultado de la colaboración de numerosas manos, corazones y mentes. Con sinceridad, considero que esta etapa de mi vida, que culmina con la tesis doctoral, es un claro testimonio de esta cita.

Ante todo, deseo dedicar este logro a mi amada familia. Reconozco plenamente que el camino no fue fácil, sin embargo, su amor incondicional y apoyo inquebrantable fueron el motor que me impulsó a seguir adelante. Les estaré eternamente agradecida por cada sacrificio y aliento brindado en este recorrido.

Agradezco de todo corazón al Dr. Rafael Fernandez y al Dr. Enrique Puliafito, mis estimados directores, que me acompañaron y guiaron a lo largo de todo este proceso. Su orientación y valiosos comentarios fueron indispensables para dar forma a mis ideas y concretar este trabajo de investigación. A mis amigos y colegas que creyeron en mi cuando yo misma dudaba, y cuyas palabras de aliento me otorgaron la confianza necesaria para superar los desafíos.

A todas las personas cuya compañía, de manera directa o indirecta, contribuyó a materializar esta investigación, tanto a quienes la leyeron y debatieron conmigo, como aquellos que compartieron ideas o simplemente me brindaron su tiempo y atención mientras organizaba mis propios pensamientos. Cada uno de ustedes desempeñaron un papel fundamental en este proceso.

Agradezco al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) por su invaluable apoyo financiero que hizo posible la realización de mis estudios de doctorado. También quiero expresar mi gratitud a la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad de Cuyo por brindarme acceso al sistema de cómputo de alto rendimiento TOKO, que fue fundamental para el desarrollo de mi investigación. Por último, no puedo dejar de mencionar mi agradecimiento a mis amigos y amigas de Mendoza (y Argentina) por su cálida y hospitalaria acogida, convirtiendo este lugar en mi segundo hogar.

Índice de contenidos

Agradecimientos	3
Índice de contenidos.....	4
Índice de Figuras	9
Índice de Tablas	13
Lista de abreviaturas.....	15
Resumen	19
1 Introducción	21
1.1 Introducción general.....	21
1.1.1 Calidad del aire y química atmosférica	22
1.1.2 Modelos atmosféricos.....	23
1.2 Hipótesis.....	26
1.3 Objetivos	26
1.3.1 Objetivo General	26
1.3.2 Objetivos Específicos.....	27
1.4 Contribuciones del estudio	27
1.5 Estructura y organización	29
2 Configuración de WRF-Chem para Argentina.....	31
2.1 Descripción del modelo WRF-Chem	31
2.1.1 Modelo WRF.....	32
2.1.1.1 Discretización vertical	32
2.1.1.2 Discretización horizontal.....	33
2.1.1.3 Discretización temporal	34
2.1.2 Sistema de preprocesamiento de WRF (WPS).....	34
2.1.3 Configuración regional de WPS.....	36
2.1.3.1 Topografía.....	36
2.1.3.2 Uso y cobertura del suelo (LULC).....	36

2.1.3.3	Tipos de suelo.....	38
2.1.3.4	Mapa político.....	38
2.1.3.5	Zona Horaria.....	39
2.1.3.6	Implementación de las modificaciones en WPS.....	39
2.2	Parametrizaciones físicas.....	43
2.2.1	Parametrización de radiación	44
2.2.2	Parametrización de cúmulos.....	45
2.2.3	Parametrización de microfísica de nubes	46
2.2.4	Parametrización de PBL.....	47
2.2.5	Parametrización de superficie.....	48
2.3	Mecanismos químicos.....	49
2.3.1	Esquema de fase gaseosa	51
2.3.1.1	Agrupación por enlaces de carbono	52
2.3.1.2	Agrupación por moléculas sustitutas.....	53
2.3.2	Esquema de aerosoles.....	54
2.3.3	Esquema de fotólisis.....	55
2.3.4	Especiación química en WRF-Chem.....	56
2.3.4.1	Especiación para gases.....	56
2.3.4.2	Especiación para aerosoles	60
2.4	Condiciones iniciales y de contorno químicas (IC/BC)	61
2.5	WRF-Chem Kinetic PreProcessor (WRF-Chem-KPP).....	64
2.6	Implementación del modelo.....	67
2.6.1	Pautas para la selección del dominio de simulación	67
2.6.2	Configuración y compilación de WRF-Chem-KPP	68
2.6.3	Paralelización de procesos en WRF	72
2.6.4	Clúster TOKO	73
2.6.5	Análisis de rendimiento de WRF-Chem-KPP en el clúster TOKO	74
3	Emisiones.....	77

3.1	Emisiones antropogénicas	78
3.1.1	Inventarios de emisiones antropogénicas	79
3.1.2	Inventarios de emisiones antropogénicas utilizados en esta tesis	83
3.1.3	Procesamiento de las emisiones antropogénicas	88
3.1.3.1	Anthro_emis	89
3.1.3.2	Preparación de los inventarios para anthro_emis.....	91
3.1.3.3	Anthro_emis_merge	94
3.1.3.4	Pasos para ejecutar anthro_emis_merge.....	97
3.2	Emisiones biogénicas	97
3.3	Emisiones por quema de biomasa.....	99
4	Observaciones disponibles y metodología de validación.....	101
4.1	Monitoreo de la calidad del aire en Argentina.....	102
4.2	Observaciones in situ en Buenos Aires.....	105
4.2.1	Selección del periodo de validación.....	107
4.3	Datos satelitales	111
4.4	Evaluación de desempeño del modelo.....	114
5	Influencia del inventario de emisiones en la distribución espacio-temporal de los contaminantes atmosféricos modelados en Buenos Aires, Argentina, utilizando WRF-Chem.....	116
5.1	Introducción	116
5.2	Metodología	118
5.2.1	Área de estudio y dominios de simulación	118
5.2.2	Configuración del modelo	119
5.2.3	Inventarios de emisión y casos de simulación de WRF-Chem	120
5.2.4	Metodología para la evaluación del rendimiento del modelo	122
5.3	Resultados y discusión	123
5.3.1	Evaluación meteorológica	123
5.3.2	Variación temporal de los contaminantes y evaluación de la calidad del aire modelada	124
5.3.2.1	Dióxido de nitrógeno (NO ₂) y Ozono (O ₃)	126

5.3.2.2	Material Particulado (PM ₁₀ y PM _{2.5}).....	129
5.3.3	Evaluación espacial.....	131
5.3.4	Comparación con datos satelitales	132
5.3.5	Ubicación recomendada para futuras estaciones de calidad del aire	135
5.4	Conclusiones parciales	136
6	Modelado regional de la calidad del aire en alta resolución y sensibilidad estacional a los sectores de emisión antropogénicos	138
6.1	Introducción	138
6.2	Metodología	140
6.2.1	Área de estudio, dominio de simulación y definición de regiones	140
6.2.2	Configuración del modelo	141
6.2.3	Inventarios de emisión y casos de simulación	142
6.2.4	Selección de áreas de referencia	149
6.3	Resultados y discusión	151
6.3.1	Evaluación del modelo	152
6.3.2	Influencia de las condiciones iniciales y de contorno.....	155
6.3.3	Variabilidad espacio-temporal de las concentraciones superficiales simuladas	157
6.3.3.1	Dióxido de nitrógeno (NO ₂).....	157
6.3.3.2	Material Particulado (PM ₁₀ y PM _{2.5}).....	159
6.3.4	Contribución estacional de los sectores de emisión	162
6.3.4.1	Dióxido de nitrógeno (NO ₂).....	164
6.3.4.2	Material Particulado (PM ₁₀ y PM _{2.5}).....	166
6.4	Conclusiones parciales.....	168
7	Conclusiones y trabajo futuro	170
7.1	Conclusiones generales y consideraciones finales.....	170
7.2	Trabajo futuro	173
8	Referencias.....	175
Anexo A.	Contribuciones en otros trabajos científicos relacionados.....	195

A.1	Pasantía de investigación IQFR-CSIC (España).....	195
A.2	Colaboración en otros proyectos del grupo GEAA-UTN	198
A.2.1	Impacto de las emisiones de aerosoles sobre las precipitaciones de los andes centrales.....	198
A.2.2	Evaluación de los aerosoles absorbentes en la reducción del albedo en nieve en la primavera austral de los Andes Centrales	199
A.3	Otras publicaciones.....	201
A.3.1	Artículos publicados en revistas con referato	201
A.3.2	Trabajos publicados en congresos nacionales e internacionales.....	201
A.3.3	Presentaciones en congresos y conferencias internacionales.....	202
A.3.4	Presentaciones en congresos y conferencias a nivel nacional/provincial	203
Anexo B.	Comparación entre los valores simulados y observados de las especies PM ₁₀ y NO ₂ para las estaciones de monitoreo Córdoba, Centenario y La Boca	205

Índice de Figuras

Figura 2-1. Diagrama de los procesos de WRF-Chem. (Elaboración propia)	31
Figura 2-2. Coordenada sigma (η) en WRF-ARW: coordenada η tradicional (Panel izquierdo) y coordenada η híbrida (Panel derecho). (Adaptada de Skamarock et al. (2021)).....	33
Figura 2-3. Representación de la cuadrícula horizontal (Panel izquierdo) y la cuadrícula vertical (Panel derecho) en WRF-ARW. (Adaptada de Skamarock et al. (2021)).....	34
Figura 2-4. a) Configuración de LULC según las 24 categorías del USGS, en el dominio de mayor resolución presentado en el Capítulo 5 (d03: 1.3 x1.3 km) para Buenos Aires. a) LULC por defecto de WRF, b) LULC Argentina (USGS/GEAA). (Elaboración propia).....	38
Figura 2-5. Mapas implementados en WPS para un dominio de simulación de Sudamérica: a) Mapa político, las diferencias de color están representadas por valores numéricos, que difieren de un país a otro. b) Mapa de husos horarios, las diferencias de color están representadas por valores numéricos según cada zona horaria (amarillo: UTC-3; verde claro: UTC-4; verde oscuro, UTC-5). (Elaboración propia).....	39
Figura 2-6. Interacciones directas de las parametrizaciones físicas de WRF-ARW y esquemas seleccionados para esta tesis. Longitud de onda corta (SW), longitud de onda larga (LW), temperatura (T), razón de mezcla de vapor de agua (Qv). (Adaptado de Dudhia (2014)).....	43
Figura 2-7. Interacción entre las parametrizaciones de superficie y el esquema de PBL. (Elaboración propia).....	48
Figura 2-8. Resumen de las interacciones entre la química atmosférica y la meteorología. (Elaboración propia)	50
Figura 2-9. Representación simplificada de la química troposférica. (Elaboración propia)	52
Figura 2-10. Representación gráfica de los esquemas de aerosoles a) modal y b) seccional	55
Figura 2-11. Condiciones iniciales generadas con MOZART-4 para un dominio centrado en los Andes Centrales, para a) BC y b) OIN. (Elaboración propia).....	63
Figura 2-12. Condiciones iniciales (wrfinput_d01) para NO_2 ($\mu\text{g m}^{-3}$) generadas a partir de MOZART-4 (Panel izquierdo) y CAM-Chem (Panel derecho). (Elaboración propia)	64
Figura 3-1. Fuentes de contaminación antropogénica. Adaptado de William Green/Mr. G. Science (traducido) CC BY-SA 4.0	79
Figura 3-2. Distribución espacial de las emisiones antropogénicas anuales para Argentina (año 2015), obtenidas del inventario EDGAR para las especies a) NO_x y c) PM_{10} ; y del inventario GEAA-AEI para las especies b) NO_x y d) PM_{10} . (Elaboración propia).....	86
Figura 3-3. Emisiones totales de NO_x procedentes de GEAA-AEI y EDGAR: a) serie anual y b) estacionalidad; Emisiones totales de PM_{10} procedentes de GEAA-AEI y EDGAR: c) serie anual y d) estacionalidad. (Elaboración propia)	88

Figura 3-4. Diagrama de flujo de la herramienta anthro_emis original (en color negro) y modificaciones incluidas en la versión anthro_emis_merge (en color rojo). (Elaboración propia)	90
Figura 3-5. Diagrama de flujo general de la preparación de inventarios de emisiones para anthro_emis. (Elaboración propia)	93
Figura 3-6. Combinación de un inventario de emisiones global (EDGAR) y uno regional (GEAA-AEI) realizada por anthro_emis_merge usando como base la variable POLIT_MAP. (Elaboración propia).....	95
Figura 3-7. Perfil temporal horario normalizado aplicado para a) las emisiones vehiculares de las rutas nacionales y accesos a las ciudades (línea punteada) y de las rutas urbanas (línea continua), b) emisiones relacionadas con el sector energético. También se muestra la variación constante que utiliza por defecto anthro_emis (línea discontinua). (Elaboración propia)	96
Figura 3-8. Emisiones anuales globales de isopreno generadas a partir de MEGAN (Escala logarítmica) (Bates & Jacob, 2019).	98
Figura 4-1. Ubicación de las estaciones de monitoreo de meteorología y calidad del aire dentro de CABA. (Elaboración propia)	106
Figura 4-2. Rosas de viento para las dos estaciones con datos meteorológicos. a) AEP, b) EMC-I para el periodo de tiempo entre el 20 de mayo y el 8 de junio de 2018. (Elaboración propia).....	108
Figura 4-3. Diagrama de cajas de las series de tiempo diarias para las concentraciones de a) NO ₂ (µg m ⁻³) y b) PM ₁₀ (µg m ⁻³) en las tres estaciones de CABA analizadas: Centenario (rojo), Córdoba (azul) y La Boca (amarillo), durante los años 2017, 2018 y 2019. La media para las tres estaciones (CBC) se muestra en gris. (Elaboración propia)	109
Figura 4-4. Diagrama de cajas de las concentraciones mensuales de NO ₂ (µg m ⁻³) en las tres estaciones de CABA analizadas: Centenario (rojo), Córdoba (azul) y La Boca (amarillo), durante el año 2018. La media para las tres estaciones (CBC) se muestra en gris. (Elaboración propia)	109
Figura 4-5. Diagrama de cajas de las concentraciones mensuales de PM ₁₀ (µg m ⁻³) en las tres estaciones de CABA analizadas: Centenario (rojo), Córdoba (azul) y La Boca (amarillo), durante el año 2018. La media para las tres estaciones (CBC) se muestra en gris. (Elaboración propia)	110
Figura 4-6. Ciclos diurnos promedio de NO ₂ y PM ₁₀ durante el periodo de simulación en las estaciones de CABA analizadas: Centenario (rojo), Córdoba (azul) y La Boca (amarillo). La media para las tres estaciones (CBC) se muestra en negro	110
Figura 4-7. Principio de medición de TROPOMI. (Adaptada de Veefkind et al. (2012))	112
Figura 4-8. Columna troposférica de NO ₂ , obtenida de con el instrumento TROPOMI para una pasada sobre Argentina para el día 13 de abril de 2020 entre las 17:59 y las 18:04. (Elaboración propia).....	113
Figura 5-1. a) Dominios del modelo WRF-Chem (d01, d02 y d03). Emisiones antropogénicas de NO ₂ (E_NO2, kg km ⁻² día ⁻¹) para b) d02 de GEAA-AEI, c) d03 de EDGAR-HTAP y d) d03 de GEAA-AEI. Los números 1 a 4 representan la ubicación de las estaciones de calidad del aire: Sitios de monitoreo CBC (1, 2 y 3) en los que solo se miden NO ₂ y PM ₁₀ , y el sitio EMC-I (4) que mide	

NO ₂ , PM ₁₀ , PM _{2.5} , O ₃ y meteorología. El número 5 muestra la estación meteorológica del aeropuerto local Jorge Newbery (ver Sección 4.2). (Elaboración propia)	119
Figura 5-2. Series de tiempo horarias de la velocidad del viento en superficie (VV, km h ⁻¹), la dirección del viento (DV, °) y la precipitación (mm h ⁻¹) en cada sitio de monitoreo: a) VV, b) DV, c) precipitación en EMC-I, d) VV y e) DV en AEP, para las observaciones (negro) y todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). (Elaboración propia).....	124
Figura 5-3. Ciclos diurnos promedio en cada sitio de medición para las concentraciones superficiales de: a) NO ₂ , b) PM ₁₀ , c) PM _{2.5} y d) O ₃ en EMC-I, y e) NO ₂ , f) PM ₁₀ en CBC (eje izquierdo, µg m ⁻³), para todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). Las observaciones se muestran en línea negra y las áreas sombreadas representan la variabilidad de la serie temporal, definida como 1 desviación estándar. La línea negra con triángulos hacia abajo indica la altura de la PBL simulada (eje derecho) en metros (m). (Elaboración propia)	126
Figura 5-4. Distribución de la densidad de frecuencias en cada sitio de medición para a) NO ₂ , b) PM ₁₀ , c) PM _{2.5} y d) O ₃ en EMC-I, y e) NO ₂ , f) PM ₁₀ en CBC, para todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). Las observaciones se muestran en línea negra. La estimación de la densidad se realizó asumiendo en una distribución de frecuencias gaussiana. (Elaboración propia)	126
Figura 5-5. Series temporales horarias de los contaminantes superficiales en fase gaseosa (µg m ⁻³) en cada sitio de medición: a) NO ₂ en EMC-I, b) NO ₂ en CBC y c) O ₃ en EMC-I, para las observaciones (negro) y todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). (Elaboración propia)	128
Figura 5-6. Series temporales horarias de material particulado superficial (µg m ⁻³) en cada sitio de monitoreo: a) PM ₁₀ en EMC-I, b) PM ₁₀ en CBC, y c) PM _{2.5} en EMC-I, para las observaciones (negro) y todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). (Elaboración propia).....	130
Figura 5-7. Concentraciones superficiales promedio (µg m ⁻³) de NO ₂ para: a) GEAAnp b) EDGARnp y de PM ₁₀ para: c) GEAAnp d) EDGARnp para el periodo de simulación en el dominio más interno (d03). Las líneas horizontales representan las secciones transversales utilizadas para analizar los puntos de medición sugeridos A, B y C (ver la sección 5.4.5). (Elaboración propia)	132
Figura 5-8. Columna troposférica de NO ₂ (moléculas cm ⁻²) promediada para el período modelado a partir de las simulaciones a) GEAAnp, b) EDGARnp y c) producto SSP-TROPOMI. Secciones transversales de la columna troposférica de NO ₂ (moléculas cm ⁻²) para el Área Metropolitana de Buenos Aires en d) 34.6° S y e) 58.4° O. La información de todos los paneles en esta figura corresponde a los datos obtenidos a partir de TROPOMI en una cuadrícula de resolución de 0.1° (negro) y los datos de NO ₂ integrados verticalmente hasta la tropopausa dentro del d01 para los casos de simulación: EDGARnp (verde) y GEAAnp (azul). (Elaboración propia)	133
Figura 5-9. Secciones transversales de las concentraciones medias simuladas para GEAAnp (azul) y EDGARnp (verde) en el Área Metropolitana de Buenos Aires situadas en: 34° 36' 10" S (punto A) para a) NO ₂ , d) PM ₁₀ ; 34° 48' 22" S (punto B) para b) NO ₂ y e) PM ₁₀ ; 34° 27' 22" S (punto C) para c) NO ₂ y f) PM ₁₀ . La ubicación en el dominio de simulación de los puntos A, B y C se muestra en la Figura 5-7. (Elaboración propia)	136

Figura 6-1. Dominio de simulación, regiones de Argentina delimitadas para este estudio (áreas en colores) y áreas de referencia seleccionadas (recuadros negros).	141
Figura 6-2. Comparación de la columna troposférica de NO ₂ , (moléculas cm ⁻²) para TROPOMI en a) enero b) abril, c) julio y d) octubre, y para WRF-Chem en e) enero, f) abril, g) julio y h) octubre. (Elaboración propia)	153
Figura 6-3. Concentraciones promedio mensuales para la simulación de referencia (Total) y la simulación con las emisiones antropogénicas apagadas (ICBC) para las especies: a) PM ₁₀ , b) PM _{2.5} y c) NO ₂ . (Elaboración propia)	156
Figura 6-4. Distribución espacial de concentraciones medias anuales de NO ₂ (µg m ⁻³) en superficie para la simulación de referencia (Total) restando la simulación ICBC. Los diagramas de barras representan las concentraciones medias mensuales para toda la Argentina (delineado negro), para las 6 regiones definidas en la Figura 6-1 (Central, Noreste, Noroeste, Oeste, Patagonia, f: Pampa) (color azul solido) y para las áreas de referencia definidas en la sección 6.2.4 (ARF1: AMBA, ARF2: Córdoba, ARF3: Rosario, ARF4: Bahía Blanca, ARF5: Ruta 9, ARF6: Fuentes puntuales, ARF7: Cultivos, ARF8: Condiciones de Fondo) (delineado azul). (Elaboración propia)	159
Figura 6-5. Distribución espacial para las concentraciones medias anuales de PM _{2.5} (µg m ⁻³) en superficie para la simulación de referencia (Total) restando la simulación ICBC. Los diagramas de barras representan las concentraciones medias mensuales para toda la Argentina (delineado negro), para las 6 regiones definidas en la Figura 6-1 (Central, Noreste, Noroeste, Oeste, Patagonia, f: Pampa) (color azul solido) y para las áreas de referencia definidas en la Sección 6.2.4 (ARF1: AMBA, ARF2: Córdoba, ARF3: Rosario, ARF4: Bahía Blanca, ARF5: Ruta 9, ARF6: Fuentes puntuales, ARF7: Cultivos, ARF8: Condiciones de Fondo) (delineado azul). (Elaboración propia)	161
Figura 6-6. Distribución espacial para las concentraciones medias anuales de PM ₁₀ (µg m ⁻³) en superficie para la simulación de referencia (Total) restando la simulación ICBC. Los diagramas de barras representan las concentraciones medias mensuales para toda la Argentina (delineado negro), para las 6 regiones definidas en la Figura 6-1 (Central, Noreste, Noroeste, Oeste, Patagonia, f: Pampa) (color azul solido) y para las áreas de referencia definidas en la sección 6.2.4 (ARF1: AMBA, ARF2: Córdoba, ARF3: Rosario, ARF4: Bahía Blanca, ARF5: Ruta 9, ARF6: Fuentes puntuales, ARF7: Cultivos, ARF8: Condiciones de Fondo) (delineado azul). (Elaboración propia)	162
Figura 6-7. Porcentajes de contribución de los diferentes sectores a las emisiones totales mensuales (Panel izquierdo) y a las concentraciones promedio mensuales (Panel derecho) para PM _{2.5} (a y b), PM ₁₀ (c y d) y NO ₂ (e y f). Las barras de colores muestran la contribución sectorial para toda la Argentina (Arg) y para las 6 regiones definidas en la Figura 6-1 (CEN: Central, NE: Noreste, NOE: Noroeste, PMP: Pampa, PAT: Patagonia, OE: Oeste). (Elaboración propia).....	163
Figura 6-8. Porcentajes de contribución de los diferentes sectores a las emisiones totales mensuales (Panel izquierdo) y a las concentraciones promedio mensuales (Panel derecho) para PM _{2.5} (a y b), PM ₁₀ (c y d) y NO ₂ (e y f). Las barras de colores muestran la contribución sectorial para las áreas de referencia definidas en la sección 6.2.4 (ARF1: AMBA, ARF2: Córdoba, ARF3: Rosario, ARF4: Bahía Blanca, ARF5: Ruta 9, ARF6: Fuentes puntuales, ARF7: Cultivos, ARF8: Condiciones de Fondo). (Elaboración propia)	164

Índice de Tablas

Tabla 2-1. Esquemas de radiación de onda larga y onda corta comúnmente utilizados en WRF	45
Tabla 2-2. Esquemas de cúmulos que permiten interacción con la radiación en WRF	46
Tabla 2-3. Factores de especiación para el esquema de fase gaseosa MOZART en WRF-Chem.....	58
Tabla 2-4. Factores de especiación para el esquema de fase gaseosa CBM-Z en WRF-Chem	59
Tabla 2-5. Factores de especiación para el esquema de fase gaseosa RADM-2 en WRF-Chem	60
Tabla 2-6. Factores de especiación para los esquemas de aerosoles GOCART, MOSAIC y MADE en WRF-Chem ^a	61
Tabla 2-7. Variables de entorno para la configuración de WRF-Chem-KPP	69
Tabla 2-8. Líneas y archivos por modificar dentro de la carpeta de KPP	69
Tabla 2-9. Comandos de entrada para el archivo compile_wrf_and_deps_v1.sh.....	72
Tabla 2-10. Resultados de las pruebas de sensibilidad para el análisis de rendimiento en TOKO ...	75
Tabla 3-1 Resumen de los inventarios globales y regionales que contienen datos de emisiones antropogénicas para Argentina.....	82
Tabla 4-1 Ubicación de las estaciones de monitoreo ^{a,b,c}	106
Tabla 4-2. Umbrales de referencia establecidos por la OMS (2021) y el Decreto 1074/2018 para los contaminantes NO ₂ , O ₃ , PM ₁₀ y PM _{2.5}	111
Tabla 4-3. Expresiones matemáticas y rangos para los diferentes parámetros estadísticos	114
Tabla 5-1. Resumen de la configuración de WRF-Chem.....	120
Tabla 5-2. Emisiones antropogénicas diarias para contaminantes atmosféricos primarios en los tres dominios considerados ^a	122
Tabla 5-3. Resultados estadísticos de las variables meteorológicas simuladas para el dominio d03 ^a	123
Tabla 5-4. Comparación estadística de las series de tiempo horarias de PM ₁₀ , PM _{2.5} , O ₃ y NO ₂ simuladas en superficie y observadas para el periodo de simulación ^a	125
Tabla 5-5. Comparación estadística de la columna troposférica de NO ₂ entre las simulaciones EDGARnp y GEAAnp, y el producto satelital deTROPOMI para la misma región representada en la Figura 5-8 ^a	134
Tabla 6-1. Resumen de la configuración de WRF-Chem para el caso de estudio regional ^a	142
Tabla 6-2. Conjunto de sensibilidades realizadas por cada mes	143
Tabla 6-3. Coherencia entre sectores de emisión para los inventarios GEAA-AEI y EDGAR ^a	144

Tabla 6-4. Emisiones mensuales totales de $PM_{2.5}$ ($Mg\ mes^{-1}$) ^a	146
Tabla 6-5. Emisiones mensuales totales de PM_{10} ($Mg\ mes^{-1}$) ^a	147
Tabla 6-6. Emisiones mensuales totales de NO_2 ($Mg\ mes^{-1}$) ^a	148
Tabla 6-7. Descripción de las áreas de referencia para la evaluación del modelo	149
Tabla 6-8. Emisiones totales mensuales para NO_2 en las áreas de referencia ($Mg\ mes^{-1}$) para diferentes sectores ^a	151
Tabla 6-9. Comparación estadística de la columna troposférica de NO_2 entre las simulaciones de WRF-Chem, y el producto satelital de TROPOMI para los meses de enero, abril, julio y octubre ^a	153
Tabla 6-10. Comparación estadística de la columna troposférica de NO_2 entre las simulaciones de WRF-Chem, y el producto satelital de TROPOMI para las áreas de referencia en los meses de enero, abril, julio y octubre ^a	154

Lista de abreviaturas

ANAC	Administración Nacional de Aviación Civil
ARW	WRF de investigación avanzada (<i>Advanced Research WRF</i>)
BC	Carbono negro (<i>Black carbon</i>)
CAMMESA	Compañía Administradora del Mercado Mayorista Eléctrico de Argentina
CAMS	Emisiones globales y regionales del servicio de vigilancia de la atmósfera de Copernicus (<i>The Copernicus Atmosphere Monitoring Service global and regional emissions</i>)
CBM	Mecanismo de enlaces de carbono (<i>Carbon Bond Mechanism</i>)
CCMs	Modelos de Química-Clima (<i>Chemistry-Climate Models</i>)
CEDS	Sistema Comunitario de Datos de Emisiones (<i>Community Emissions Data System</i>)
CFCs	Compuestos clorofluorocarbonados
CIESIN	Centro para la Red Internacional de Información de Ciencias de la Tierra (<i>Center for International Earth Science Information Network</i>)
CNRT	Comisión Nacional de Regulación del Transporte
CONAE	Comisión Nacional de Actividades Espaciales
CTMs	Modelos de Transporte-Químico (<i>Chemical-Transport Models</i>)
ECLIPSE	Evaluación de los Impactos sobre el Clima y la Calidad del Aire de los Contaminantes de Vida Corta (<i>Evaluating the Climate and Air Quality Impacts of Short-Lived Pollutants</i>)
EDGAR	Base de datos de emisiones para la Investigación Atmosférica Global (<i>Emission Database for Global Atmospheric Research</i>)
ENRE	Ente Nacional Regulador de la Electricidad
EPA	Agencia de protección ambiental de los Estados Unidos (<i>United States Environmental Protection Agency</i>)
ESA	Agencia espacial europea (<i>European Space Agency</i>)
FNL	Análisis global operativo final (<i>Final Operational Global Analysis</i>)
GAINS	Modelo de Interacciones y sinergias entre los gases de efecto invernadero y la contaminación atmosférica (<i>Greenhouse gas - Air pollution Interactions and Synergies model</i>)
GAW	Vigilancia atmosférica global (<i>Global Atmospheric Watch</i>)
GDAS	Sistema Global de Asimilación de Datos (<i>Global Data Assimilation System</i>)

GEAA-UTN	El Grupo de Estudios Atmosféricos y Ambientales de la Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Mendoza
GFS	Sistema global de predicción (<i>Global Forecast System Model</i>)
GRIB	Información general distribuida regularmente en binario (<i>General Regularly-Distributed Information in Binary</i>)
GTS	Sistema Global de Telecomunicaciones (<i>Global Telecommunications System</i>)
HTAP	Grupo de Trabajo sobre Transporte hemisférico de contaminantes atmosféricos (<i>The Hemispheric Transport of Air Pollution Task Force</i>)
IC/BC	Condiciones Iniciales y de Contorno
IGBP	El Programa Internacional de la Geosfera y la Biosfera (<i>The International Geosphere Biosphere Programme</i>)
INDEC	Instituto Nacional de Estadísticas y Censos de Argentina
INTA	Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria
IPCC	Panel intergubernamental del cambio climático
IQFR-CSIC	Instituto de Química Física Rocasolano del Consejo Superior de Investigaciones Científicas de España
KPP	<i>Kinetic PreProcessor</i>
LSM	Modelo de superficie terrestre (<i>Land Surface Model</i>)
LULC	Uso y cobertura del suelo (Land Use and Land Cover)
LW	Longitud de onda larga (Longwave)
MADE	Modelo de dinámica de aerosoles modal para Europa (<i>Modal Aerosol Dynamics Model for Europe</i>)
MINEM	Ministerio de Energía y Minas
MODIS	Espectro radiómetro de imágenes de resolución moderada (<i>Moderate resolution Imaging Spectroradiometer</i>)
MOSAIC	Modelo para simular las interacciones y la química de los aerosoles (<i>Model for Simulating Aerosol Interactions and Chemistry</i>)
NBI	Necesidades básicas insatisfechas
NCAR	Centro nacional para la investigación atmosférica de los Estados Unidos (<i>National Center for Atmospheric Research</i>)
NCEP	Centros nacionales para la predicción ambiental de los Estados Unidos (<i>National Centers for Environmental Prediction</i>)
NCO	Operadores de NetCDF (<i>The NetCDF Operators</i>)

NetCDF	Formulario de datos comunes en red (Network Common Data Form)
NMM	Modelo de Mesoescala no Hidrostático (<i>Nonhydrostatic Mesoscale Model</i>)
NMVOCS	Compuestos orgánicos volátiles no metánicos (<i>Non-methane Volatile Organic Compounds</i>)
OC / ORG	Carbono orgánico (<i>Organic carbon</i>)
OIN	Otros aerosoles inorgánicos
OMS	Organización Mundial de la Salud
p	Presión
PAPILA	Proyecto de predicción de la contaminación atmosférica en América Latina y el Caribe (<i>Prediction of Air Pollution in Latin America and the Caribbean project</i>)
PBL	Capa límite atmosférica
PM	Material particulado
PM ₁₀	Material Particulado con un diámetro menor a 10 µm
PM _{2.5}	Material Particulado con un diámetro menor a 2.5 µm
Qv	Razón de mezcla de vapor de agua
RRTM	El modelo de transferencia radiativa rápido y preciso (<i>The Rapid and accurate Radiative Transfer Model</i>)
SRTM3	Misión de topografía por radar del transbordador (<i>Shuttle Radar Topography Mission</i>)
SW	Longitud de onda corta (Shortwave)
T	Temperatura
TCNA	Tercera Comunicación Nacional de Cambio Climático para Argentina
TKE	Esquemas de energía cinética turbulenta (Turbulent Kinetic Energy schemes)
TSP	Partículas totales suspendidas
TSPs	Partículas suspendidas totales
UNFCCC	Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático (<i>United Nations Framework Convention on Climate Change</i>)
USGS	Servicio Geológico de Estados Unidos (<i>U.S. Geological Survey</i>)
VOCs	Compuestos orgánicos volátiles (<i>Volatile Organic Compounds</i>)
WPS	Sistema de preprocesamiento de WRF (<i>WRF Preprocessing System</i>)
WRF	Modelo para investigación y previsión meteorológica (<i>Weather Research and Forecasting model</i>)

WRF-Chem Modelo para investigación y previsión meteorológica con química (*Weather Research and Forecasting model with Chemistry*)

yacc Otro compilador de compiladores más (*Yet Another Compiler-Compiler*)

Resumen

El modelo Weather Research and Forecasting with Chemistry (WRF-Chem) es un sistema de predicción regional que simula procesos meteorológicos y químicos, tanto en fase gaseosa como para aerosoles de manera acoplada. En este trabajo de investigación, el modelo WRF-Chem se utiliza para el estudio de la química atmosférica utilizando distintas escalas espacio-temporales, con un enfoque específico en la calidad del aire regional en Argentina. El objetivo principal de este estudio es evaluar la influencia de las fuentes de emisión primarias, tanto de origen natural como antropogénico, sobre la capacidad oxidativa de la atmósfera y la formación de contaminantes como óxidos de nitrógeno, ozono y aerosoles. Para lograr esto, en esta tesis se ha desarrollado una configuración optimizada del modelo WRF-Chem y se han generado herramientas computacionales y códigos de pre/post-procesamiento que permiten adaptar y reestructurar los inventarios de emisión existentes para Argentina, así como otras bases de datos estáticas disponibles en alta resolución, para su posterior utilización dentro del modelo. La tesis describe en detalle la metodología y desarrollos realizados para obtener la configuración regional optimizada (Capítulos 2 y 3), así como la evaluación y validación del modelo a través de dos casos de estudio (Capítulos 5 y 6). El primer caso de estudio se centra en la simulación de la calidad del aire sobre el Área Metropolitana de Buenos Aires, utilizando el modelo WRF-Chem con dos conjuntos de datos de emisiones antropogénicas diferentes: el Inventario de Emisiones de Alta Resolución de Argentina (GEAA-AEI), desarrollado por nuestro grupo de investigación, y la Base de Datos de Emisiones para la Investigación Atmosférica Global - Transporte Hemisférico de la Contaminación Atmosférica (EDGAR-HTAP). Se implementó una configuración optimizada para Argentina con tres dominios anidados y diferentes perfiles temporales. La validación se realizó utilizando mediciones de estaciones de monitoreo en superficie, así como comparando las simulaciones con las columnas troposféricas derivadas de TROPOMI. Si bien el modelo tiene un buen desempeño en la cercanía a las estaciones de monitoreo, se observaron discrepancias en la distribución espacial de las concentraciones tanto de gases como de aerosoles para las distintas configuraciones, especialmente en áreas suburbanas sin observaciones disponibles, identificando la necesidad de incorporar más sitios de monitoreo para mejorar la precisión de los resultados. En el segundo estudio, se utilizó el mismo modelo para evaluar la contribución espacial y temporal de diferentes sectores de emisiones antropogénicas en el modelado regional de la calidad del aire en todo el territorio argentino, en base al último inventario de emisiones nacional de alta resolución (GEAA-AEI). Se realizaron simulaciones independientes para cada estación del año, considerando un dominio regional de alta resolución en el cual se seleccionaron áreas de referencia específicas para la evaluación. Se llevaron a cabo seis experimentos de simulación para cada estación, cuantificando las contribuciones de cinco sectores de emisión (Transporte, Energía, Industrial, Residencial y Agricultura/Quema de biomasa) y evaluando la influencia de las condiciones iniciales y de contorno. El rendimiento del modelo se evaluó

comparándolo con productos satelitales derivados de TROPOMI. Se identificaron las emisiones predominantes que afectan las concentraciones simuladas tanto para las diferentes regiones del país como para las áreas de referencia, con variaciones según la estacionalidad y las especies químicas consideradas. En general, los resultados obtenidos a través de los casos de estudio han proporcionado información valiosa sobre la distribución espacial y temporal de los contaminantes, así como sobre las principales fuentes de emisión que contribuyen a la formación los mismos. Se concluye que la implementación de una configuración optimizada del modelo WRF-Chem, en conjunto con un inventario de emisiones en alta resolución, ha mejorado tanto la precisión como el nivel de detalle de las simulaciones realizadas. Se reconoce el papel crítico que desempeña la resolución temporal y espacial del inventario de emisiones en la representación de los eventos de contaminación y la química atmosférica. Finalmente, la metodología descrita en este estudio no solo proporciona una base sólida para identificar las fuentes de emisión más significativas y evaluar su impacto en la calidad del aire a nivel regional, sino que también permite actualizar información relevante que puede ser de utilidad para respaldar estudios que evalúen los niveles de exposición de la población y contribuir en la formulación de políticas y medidas de mitigación de la contaminación atmosférica en Argentina y en otras regiones de América del Sur.

1 Introducción

1.1 Introducción general

La contaminación del aire es la condición atmosférica en la que sustancias químicas o combinaciones de ellas están presentes en concentraciones superiores a sus niveles ambientales normales (atmósfera limpia), con cantidades y periodos de tiempo lo suficientemente elevados como para ser perjudiciales para la salud humana, la vegetación, los animales, el desarrollo de las actividades económicas y la sostenibilidad ambiental en general (Pal Arya, 1999). El análisis de la contaminación atmosférica, su distribución, posibles fuentes contaminantes, así como sus interacciones con el entorno, resultan de gran importancia si se quiere conseguir evitar o reducir dichos efectos adversos.

En este sentido, la calidad del aire para una zona específica es el producto de la interacción de factores como las condiciones climáticas, la topografía regional y las emisiones provenientes tanto de fuentes naturales como antropogénicas (Puliafito et al., 2011). No obstante, aunque tanto los procesos naturales como las actividades humanas pueden generar cambios importantes en la composición natural de la atmósfera, se estima que los impactos antropogénicos son mucho mayores que los naturales (IPCC, 2007). Las fuentes naturales de emisión pueden estar asociadas a procesos biogénicos como la resuspensión de partículas de polvo por el viento, los incendios, las erupciones volcánicas, y también a procesos fisiológicos de la vegetación (continental y oceánica), constituyendo una importante fuente de especies químicas como los compuestos orgánicos volátiles no metánicos (NMVOCs), las sustancias halogenadas y los aerosoles. Por otro lado, las fuentes antropogénicas están vinculadas principalmente a ciudades y regiones con altas tasas de crecimiento demográfico, donde los índices de urbanización cada vez mayores, sumados al incesante crecimiento económico, conducen a una mayor demanda de recursos en diversas áreas de la actividad humana (p. ej., el transporte, la generación de energía y la producción industrial). En particular, las actividades de transporte y generación de energía representan las principales fuentes de contaminación en dichas regiones (p. ej., los automóviles o las emisiones de las centrales térmicas), con otros emisores menores como las zonas comerciales y residenciales (Wuebbles & Sanyal, 2015). Según Naciones Unidas, el 55% de la población mundial vive en ciudades y esta cifra seguirá creciendo en los próximos años (Naciones Unidas, 2014). Por su parte, en América Latina, cerca del 80% de la población es urbana, porcentaje que se eleva incluso al 92% en Argentina (PNUMA, 2012). A esto se suma que al menos la mitad de la población urbana global está expuesta a niveles de contaminación que superan hasta 2.5 veces los estándares de la Organización Mundial de la Salud (Gómez Peláez et al., 2020; OMS, 2016).

1.1.1 Calidad del aire y química atmosférica

Los contaminantes se pueden clasificar en primarios y secundarios según su origen. Por un lado, los contaminantes primarios son aquellos emitidos directamente a la atmósfera a partir de diversas fuentes naturales y antropogénicas, entre ellos se destacan el monóxido de carbono (CO), los óxidos de nitrógeno (NOx) y los óxidos de azufre (SOx), NMVOCs, los compuestos clorofluorocarbonados (CFCs) y los halones, así como las partículas (PM) o aerosoles. Por otro lado, los contaminantes secundarios son los que se forman a partir de la interacción entre dos o más contaminantes primarios y sus reacciones con otros componentes de la atmósfera, entre los que se encuentran el ozono (O₃), los sulfatos, los nitratos y los aerosoles secundarios. Aunque la contaminación del aire tiende a ser más alta alrededor de las fuentes de emisión, no necesariamente permanece solo sobre las áreas urbanizadas. Muchas de estas sustancias también pueden ser transportadas y dispersadas tanto hacia otras regiones como hacia capas más altas de la atmósfera, afectando incluso zonas mucho más alejadas del foco de emisión. Esto puede generar efectos adversos a diferentes escalas, por ejemplo, a escala regional algunos compuestos provenientes de los SOx y los NOx causan la lluvia ácida. Además, especies químicas tales como los NOx y los NMVOCs son importantes para la formación de ozono troposférico (principal componente del smog fotoquímico). A escala global, los CFCs y otros halocarbonos han sido los principales responsables del agotamiento del ozono estratosférico, provocando la disminución de la capa de ozono. Por último, los aerosoles, especialmente el material particulado con diámetros menores a 2.5 µm (PM_{2.5}), puede alojarse en lo más profundo de los pulmones y, por tanto, es especialmente preocupante para la salud pública (Wuebbles & Sanyal, 2015). En vista de todo lo anterior, en el 2006 la organización mundial de la salud (OMS) estableció niveles guía para PM₁₀, PM_{2.5}, O₃, NO₂, y SO₂, con el objetivo de reducir la contaminación del aire, especialmente en áreas altamente contaminadas (OMS, 2006).

En todo el mundo se están llevando a cabo innumerables esfuerzos para comprender y predecir el impacto de las actividades humanas en la composición atmosférica, mediante la integración de diferentes técnicas de observación con modelos matemáticos. En aquellos lugares en los que se dispone de altos recursos (p. ej., en las grandes ciudades de los países desarrollados), la calidad del aire es monitoreada en tiempo real a través de redes de estaciones fijas y certificadas. Sin embargo, los elevados costos de instalación y mantenimiento de dichas estaciones hacen que este tipo de monitoreo sea relativamente escaso en los países en vías de desarrollo. Esta es la situación, por ejemplo, en la mayoría de los países de Sudamérica, donde las redes de calidad del aire están menos consolidadas en comparación con otras regiones como Estados Unidos, Europa y Asia Oriental (Riojas-Rodríguez et al., 2016). Por consiguiente, en muchas ocasiones, la red de monitoreo fija suele complementarse con estaciones móviles equipadas con la misma instrumentación que las estaciones fijas, lo que permite realizar mediciones durante periodos de tiempo determinados en lugares no accesibles con una red de

monitoreo fija y pequeña. De este modo, se logra obtener información adicional sobre el comportamiento de la contaminación, pero se limita a una cobertura temporal incompleta (Castell et al., 2017).

1.1.2 Modelos atmosféricos

En ausencia de una red densa y continua de monitoreo de la calidad del aire, los modelos atmosféricos surgen como una poderosa herramienta, ya que permiten estimar la concentración y las fuentes de emisión de diferentes sustancias atmosféricas en un momento y lugar determinados. Dichos modelos constituyen un útil complemento a las estaciones de monitoreo, permitiendo conocer el estado de la atmósfera y las concentraciones de los contaminantes en diversas resoluciones espacio-temporales, y aportando también al desarrollo de otro tipo de tareas, tales como el pronóstico y evaluación de diferentes escenarios, el análisis de sensibilidad de la contribución de diferentes fuentes de emisión, entre otras. La complementación entre las observaciones y el modelo resulta especialmente útil para el establecimiento de guías y políticas públicas destinadas a reducir la contaminación ambiental. Un modelo atmosférico, es una representación acoplada de los procesos dinámicos, físicos, químicos y radiativos de la atmósfera, que son descritos matemáticamente mediante ecuaciones diferenciales parciales, ecuaciones diferenciales ordinarias, ecuaciones parametrizadas y ecuaciones empíricas. Estas ecuaciones son sustituidas por ciertas aproximaciones, que se describen y codifican de tal manera que puedan ser resueltas y procesadas por un ordenador o un conjunto de ordenadores de manera paralelizada (Jacobson, 2005). Los modelos atmosféricos permiten simular una gran variedad de procesos (e interacciones entre ellos) en diferentes escalas espaciales y temporales. Una de las aplicaciones de este tipo de modelos son los modelos de calidad de aire, los cuales permiten estimar la concentración y las fuentes de emisión para contaminantes u otros compuestos químicos de interés en un momento y lugar determinado en función de diversos factores locales.

En los últimos años, se han desarrollado complejos modelos atmosféricos, tanto globales como regionales, que incluyen la interacción entre la química y la meteorología con distintos grados de complejidad (Brasseur & Solomon, 2005; Jacobson, 2005). A escala global, los Modelos de Química-Clima (CCMs, *Chemistry-Climate Models*) permiten obtener la distribución espacio-temporal de las especies químicas reactivas, utilizando parametrizaciones simplificadas de los principales procesos físicos y químicos que ocurren en la atmósfera, biósfera y océanos. A nivel regional, existen modelos de Transporte-Químico (CTMs, *Chemical-Transport Models*), que pueden acoplarse a los CCMs e incluyen una representación más refinada de los mecanismos de reactividad química, así como la advección, el transporte y la distribución de compuestos primarios y secundarios. Cuando se ejecuta a escala regional, la química detallada y el acoplamiento online entre las diferentes partes del modelo en combinación con una resolución relativamente fina, convierte a los CTMs en una herramienta ideal para

estudiar los efectos regionales de las diferentes especies de gases y aerosoles atmosféricos (Zhang et al., 2008).

Uno de los CTMs más utilizados en el mundo es el *Weather Research and Forecasting model with Chemistry* (WRF-Chem, Grell et al., 2005), que se basa en el modelo meteorológico WRF acoplado con un módulo de química (Michalakes et al., 2005). La estructura dinámica de WRF-Chem permite realizar estudios multiescala en una amplia variedad de dominios anidados, que pueden considerarse de forma acoplada el transporte de gases y aerosoles a escala sinóptica y/o continental, la deposición, los patrones de emisión, la transformación química, la interacción con los aerosoles, los procesos de fotólisis, la transferencia radiativa, la microfísica de las nubes, la interacción con los vientos locales, etc. (Puliafito et al., 2011). Este modelo ha sido ampliamente utilizado para el análisis de la calidad del aire en todo el mundo, abarcando temas como: la determinación de las concentraciones de ozono en regiones topográficamente complejas (Schürmann et al., 2009), la evaluación de los impactos de diferentes tipos de inventarios de emisiones en la calidad del aire regional (Wang et al., 2010; Zhong et al., 2016), la caracterización estacional de la contaminación atmosférica en áreas metropolitanas (Bouarar et al., 2019), la obtención de la variación temporal y espacial de los contaminantes en las megaciudades (Ying et al., 2009), y el análisis de la influencia de los inventarios de emisiones locales en la concentración de ozono y PM en ciudades de tamaño intermedio (González et al., 2018).

El rendimiento de un CTM depende de la calidad de la información proporcionada como entrada, y suele requerir datos de alta resolución temporal y espacial (Cirillo et al., 1996). En este sentido, el uso de inventarios de emisiones precisos y validados resulta ser un factor fundamental en la modelación de la calidad del aire (Kurata et al., 2004; Placet, 2000; Puliafito et al., 2011). Diversas bases de datos globales, como por ejemplo, *The Emissions Database for Global Atmospheric Research* (EDGAR, Crippa et al., 2020) y *The Copernicus Atmosphere Monitoring Service global and regional emissions* (CAMS, Granier et al., 2019), que se han desarrollado con el fin de apoyar la formulación de políticas públicas y controlar el cumplimiento de las normativas nacionales y mundiales en materia de emisiones de gases de efecto invernadero, también ofrecen información detallada de emisiones que puede utilizarse como datos de entrada en los modelos atmosféricos y climáticos (Crippa et al., 2018; Li et al., 2016; Oda & Maksyutov, 2011). Estos conjuntos de datos suelen definirse con una baja resolución espacial, lo que resulta desfavorable a la hora de realizar estudios regionales más detallados sobre la calidad del aire. Por el contrario, el uso de inventarios de emisiones regionales con alta resolución que incluyan factores de emisión y datos de actividad específicos de la región de interés resulta más adecuado, ya que, al proporcionar una distribución espacio-temporal de las emisiones más detallada puede contribuir a mejorar la precisión de las estimaciones (González et al., 2018). Diferentes estudios realizados en todo el mundo, incluyendo China (Ma & van Aardenne, 2004), el sudeste asiático (Amnuaylojaroen et al., 2014), Estados Unidos (Tao et al., 2004), Europa (De Meij et al., 2006) y México (Ying et al., 2009), han

informado diferencias en las concentraciones de contaminantes superficiales simuladas utilizando distintos inventarios de emisiones antropogénicas como entradas al WRF-Chem, evidenciando la sensibilidad de los contaminantes simulados a la distribución espacio-temporal de las emisiones y destacando la importancia que la incertidumbre en los inventarios de emisiones puede tener en los resultados de la simulación de la calidad del aire (Zhong et al., 2016).

Además de los inventarios de emisiones, un CTM recibe otra información relevante como datos de entrada, como por ejemplo las bases de datos estáticas/dinámicas y las condiciones iniciales y de contorno (IC/BC). En el caso de WRF-Chem existe una configuración por defecto que permite modelar cualquier región del planeta utilizando bases de datos globales, pero también es posible utilizar campos estáticos y dinámicos de mayor resolución espacio-temporal obtenidos a partir de bases de datos previamente procesadas y/o imágenes de satélite. Sin embargo, estos campos deben ser desarrollados de forma independiente por los usuarios del modelo (Peckham et al., 2010), lo que requiere un mayor desarrollo técnico, experiencia y conocimiento previo, así como el uso de información detallada en alta resolución, que no siempre existe o está disponible públicamente.

El Grupo de Estudios Atmosféricos y Ambientales (GEAA) de la Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional Mendoza, ha realizado varios estudios orientados a analizar la calidad del aire y a mejorar el rendimiento de los modelos de calidad del aire mediante la aplicación de conjuntos de datos regionales de alta resolución para Argentina. Esto incluye un modelo digital de elevación del terreno de alta resolución consistente con los datos específicos de la región, provenientes del Instituto Geográfico Argentino, un conjunto de datos de uso y cobertura del suelo (LULC) mejor distribuido y compatible con la clasificación USGS (Servicio Geológico de los Estados Unidos) (Cremades, 2017), así como un inventario de emisiones antropogénicas de alta resolución espacio-temporal para Argentina (Puliafito et al., 2021) que incluye las emisiones de vehículos (Puliafito et al., 2015), del sector energético (Puliafito et al., 2017), la producción ganadera, la agricultura y la quema de biomasa (Puliafito et al., 2020). En un principio, Puliafito & Allende (2007) y Castro et al. (2009) establecieron y evaluaron un inventario regional de emisiones para Mendoza sobre modelos de dispersión tradicionales (CALPUFF, ISC3P, HYSPLIT, etc.), concebido para evaluar el impacto de la desagregación espacial de las emisiones totales de los vehículos en cuadrículas de tamaño decreciente sobre los patrones de contaminación calculados con un modelo de dispersión. Posteriormente, se utilizó WRF-Chem en un dominio centrado en Buenos Aires para analizar la dependencia de la distribución espacial y temporal de las concentraciones de SO₂ con respecto a la altitud de emisión de las fuentes puntuales. Se encontró una mayor sensibilidad a los escenarios donde las emisiones ocurren cerca de la superficie o en grandes cantidades (Fernandez et al., 2010). Además, en los últimos años, el GEAA ha reportado varios estudios utilizando WRF-Chem para Argentina que se detallan a continuación. Por ejemplo, en Cremades et al. (2013) se aplicó el modelo para estudiar la dispersión de yoduro de plata en Mendoza, utilizado para

sembrar nubes en los sistemas de supresión de granizo. En Cremades (2017) se desarrollaron y probaron mapas de erodibilidad, para su uso en simulaciones de polvo arrastrado por el viento. Luego, (Bolaño-Ortiz et al., 2019) correlacionó datos de albedo de nieve, profundidad óptica de aerosoles y temperatura de la superficie terrestre del satélite MODIS (*Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer*) realizando análisis de regresión múltiple y usando WRF-Chem, para mostrar que las mayores áreas industriales y urbanas de Chile están produciendo un impacto negativo en el albedo de nieve, que repercute en el recurso hidrológico generado en los Andes centrales. Sin embargo, hasta la fecha de esta tesis, no se habían realizado investigaciones con una configuración detallada y mejorada de WRF-Chem-KPP que integrara todos los conjuntos de datos regionales de alta resolución previamente desarrollados en el grupo de investigación para Argentina. Esto implica también la modelación acoplada de procesos químicos y meteorológicos, abarcando aspectos como la fotoquímica, los efectos de la quema de biomasa y las condiciones IC/BC actualizadas (ver Capítulo 3). Además, esta configuración permite la utilización y adaptación de mecanismos más avanzados gracias a la inclusión específica del KPP (ver Capítulo 2). También se ha implementado la capacidad de incorporar inventarios de emisiones de diferentes resoluciones y modificar no solo la resolución espacial, sino también la temporal de los archivos de entrada del modelo mediante la versión modificada de la herramienta de preprocesamiento anthro_emiss. Los resultados demostraron, por ejemplo, que la inclusión de un perfil de emisiones redujo el sesgo promedio del modelo en aproximadamente un 50%. Asimismo, la comparación con las columnas troposféricas de NO₂ derivadas de TROPOMI reveló una alta correlación positiva ($r > 0.75$) y un sesgo generalmente positivo.

1.2 Hipótesis

Es posible obtener una mejor representación de la calidad de aire y la química troposférica en las simulaciones realizadas con el modelo WRF-Chem, a partir de la implementación de bases de datos estáticas e inventarios de emisión en alta resolución que representen correctamente las características socioeconómicas de las ciudades y regiones argentinas

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

El objetivo general de esta tesis es el de utilizar el modelo regional WRF-Chem para realizar el estudio de la contaminación atmosférica en diferentes escalas espacio-temporales, evaluando el impacto que poseen las distintas fuentes de emisión sobre la capacidad oxidativa de la atmósfera y la calidad de aire

regional. En particular, se pretende avanzar en el estudio de la calidad de aire regional en Argentina, distinguiendo el impacto de las emisiones de gases contaminantes y aerosoles proveniente de las fuentes naturales y las antropogénicas.

1.3.2 Objetivos Específicos

A fin de lograr el objetivo principal de la presente tesis se han planteado los siguientes objetivos específicos:

1. Implementar operativamente el modelo WRF-Chem para realizar el modelado 3D+temporal de la química troposférica a escala regional. Configurar el modelo de forma tal que incluya las características distintivas de la topografía local y considere las emisiones propias de las ciudades/regiones Sudamericanas.
2. Adaptar los inventarios de emisión de fuentes naturales y antropogénicas preexistentes para los diferentes países sudamericanos de forma tal que puedan incorporarse a WRF-Chem, mejorando la resolución espacio-temporal de los inventarios de emisiones globales así como la resolución espacial de otras bases de datos estáticos.
3. Incorporar distintos tipos de mecanismos de reacción atmosféricos validados en WRF-Chem adaptando la especiación química de los inventarios de emisiones regionales para que sean compatibles con los incluidos en el modelo. En particular, implementar un mecanismo de química de halógenos en WRF-Chem que incluya una completa descripción de las fuentes de emisión, la fotoquímica de halógenos en fase gaseosa y el reciclado heterogéneo.
4. Desarrollar distintas herramientas computacionales y códigos de preprocesamiento y postprocesamiento que permitan reestructurar y redimensionar tanto las bases de datos, como los inventarios de emisión, así como obtener las distribuciones latitudinales y longitudinales y los perfiles verticales/temporales en base a los requerimientos del modelo WRF-Chem y los modelos globales de los cuales se toman las condiciones iniciales y de contorno.

1.4 Contribuciones del estudio

La investigación realizada en esta tesis aporta diferentes desarrollos tecnológicos y científicos, los cuales se detallan a continuación. Dichos desarrollos fueron incorporados de manera consistente en el sistema de modelado WRF-Chem-KPP. La herramienta completamente funcional, queda a disponibilidad para ser utilizada en diversas tareas de investigación y contribuir al entendimiento de diferentes preguntas científicas relacionadas con la calidad del aire y la química atmosférica.

El estudio implementa un método de trabajo con el modelo WRF-Chem, totalmente acoplado con el compilador de módulos químicos KPP. Se describen los procedimientos utilizados para la compilación y modificaciones realizadas sobre las herramientas de preprocesamiento que fueron utilizadas para ingresar al sistema de modelado diferentes tipos de información (bases de datos estáticas de alta resolución, condiciones iniciales y de contorno químicas y meteorológicas, etc.).

Se implementa una metodología para utilizar de manera simultánea inventarios de emisiones globales y/o regionales con diversas resoluciones espacio-temporales. En este sentido, se desarrollaron múltiples herramientas computacionales de preprocesamiento para adaptar estructuralmente los inventarios de emisiones disponibles de manera que adquieran un formato legible para el modelo. Estas herramientas quedan a disposición junto las respectivas tablas de especiación aplicables a diversos mecanismos para garantizar la coherencia entre las especies de los inventarios y las especies consideradas en el modelo.

Se ha incorporado una versión actualizada del modelo WRF-Chem-KPP en las máquinas del grupo y en el Centro de Computación de Alto Rendimiento (TOKO) de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad Nacional de Cuyo (FCEN-UNCuyo). Este último procedimiento es esencial ya que implica una disminución considerable del tiempo de cómputo requerido por una simulación. Permitiendo por ejemplo incrementar los periodos/área de estudio de las simulaciones y la realización de múltiples simulaciones en paralelo.

El caso de estudio presentado en el Capítulo 5 constituye la primera implementación del modelo regional WRF-Chem-KPP considerando información de entrada en alta resolución para el estudio de la calidad del aire en la ciudad de Buenos Aires. Si bien, en el ámbito de esta tesis se plantea una aplicación regional del modelo, es indispensable validar el desempeño de este demostrando que posee resultados coherentes aún con una resolución más fina. Más adelante, en el Capítulo 6, esta aplicación se amplía a un caso de modelado de todo el país con una resolución inferior a la del caso de estudio sub-regional, pero que permitió el análisis durante distintos periodos y considerando por separado las distintas fuentes de emisión.

Finalmente se han generado códigos de postprocesamiento, para realizar el control y verificación de las diversas metodologías implementadas y para la evaluación de los archivos de salida del modelo. Los procedimientos están principalmente basados en los lenguajes de programación Python, BASH scripting, NCL y MATLAB.

1.5 Estructura y organización

La tesis está compuesta por siete capítulos incluyendo este Capítulo introductorio. El Capítulo 2 abarca los procedimientos que fueron necesarios para realizar la configuración específica de WRF-Chem para Argentina, proporcionando una descripción introductoria del sistema de modelado WRF-Chem, que comprende el núcleo meteorológico (WRF-ARW) y el sistema de preprocesamiento WPS. Se describe detalladamente la implementación de las bases de datos estáticas en alta resolución utilizadas para Argentina dentro de WPS y las correspondientes modificaciones realizadas en sus módulos. Asimismo, se presentan las principales parametrizaciones físicas y mecanismos químicos disponibles en WRF-Chem, así como aquellos seleccionados para realizar las simulaciones. Además, se incluyen algunos de los principales aspectos técnicos a tener en cuenta a la hora de configurar WRF-Chem-KPP tanto en ordenadores del grupo como en el centro de cálculo de alto rendimiento (TOKO) y, por último, se realiza un análisis de desempeño de la configuración específica para Argentina en el mencionado centro de cálculo.

En el Capítulo 3 se explican los diferentes tipos de emisiones atmosféricas necesarias para una simulación de la calidad del aire en WRF-Chem y el procedimiento asociado para su incorporación al modelo. Se discuten las principales bases de datos globales y regionales disponibles para Argentina, incluyendo las diferencias en su resolución espacio-temporal y los métodos de cálculo. Además, se presentan detalles de la implementación de los preprocesadores de emisiones de WRF-Chem junto con las correspondientes etapas de preparación de los archivos de entrada y el redimensionamiento espacio-temporal aplicado para su uso en una corrida del modelo.

El rendimiento del modelo se evalúa mediante la validación con estaciones de monitoreo continuo (observaciones in situ) e información satelital, utilizando diferentes parámetros estadísticos y gráficos. La metodología y los datos utilizados para la validación del modelo se describen en el Capítulo 4.

El Capítulo 5 desarrolla el caso de estudio sub-regional centrado en Buenos Aires en el que se evalúa la influencia del inventario de emisiones antropogénicas en la simulación de diferentes tipos de contaminantes atmosféricos. De igual forma, se presenta la descripción del área de estudio y la configuración final del modelo utilizado para las tres simulaciones comparadas. En este capítulo se analiza la variación espacial y temporal de los contaminantes modelados comparando los resultados obtenidos al utilizar un inventario de emisiones antropogénicas de alta resolución regional frente a uno global. En base a los resultados, se sugieren nuevas ubicaciones de interés para las estaciones de medición en función del tamaño y la variación de la pluma contaminante simulada.

En el Capítulo 6 se presenta el caso de estudio regional sobre un dominio de simulación focalizado en Argentina, en el cual se realiza un análisis del comportamiento estacional de las emisiones

antropogénicas y de la calidad del aire. En este mismo capítulo se realiza un estudio de mayor detalle sobre la contribución espacial y temporal de los diferentes sectores de emisión antropogénicas en la simulación de la calidad del aire regional.

Las conclusiones relevantes obtenidas a partir del trabajo desarrollado en esta tesis se resumen en el Capítulo 7, junto con algunas propuestas de posible trabajo futuro. Además, en el Anexo A se enumeran los artículos publicados como resultado de las diferentes colaboraciones, proyectos y estancias de investigación que se han llevado a cabo en paralelo a la tesis y que han contribuido en gran medida al desarrollo de esta, acompañadas de una lista de eventos nacionales e internacionales en los que se han presentado algunos resultados preliminares. Finalmente, el Anexo B presenta información complementaria para el caso de estudio sub-regional analizado en el Capítulo 5.

2 Configuración de WRF-Chem para Argentina

2.1 Descripción del modelo WRF-Chem

El modelo WRF-Chem, es un modelo de transporte químico desarrollado a través de la colaboración entre diversas instituciones científicas y universitarias (Fast et al., 2006; Grell et al., 2005). El sistema consta de un modelo meteorológico de mesoescala (WRF, *Weather Research and Forecasting model*) de tipo euleriano y no hidrostático, al cual se le pueden añadir otros módulos como, por ejemplo, WRF-Chem (Grell et al., 2005), WRF-Hydro (Gochis et al., 2020) y WRF-Fire (Mandel et al., 2011). El módulo químico (WRF-Chem) permite simular la emisión, el transporte, la mezcla y la transformación química de los gases y los aerosoles en la atmósfera simultáneamente con la meteorología (es decir, *online*), lo que hace posible la retroalimentación entre la química y la dinámica atmosférica. Los componentes químicos y meteorológicos del modelo WRF-Chem son totalmente coherentes entre sí, ya que utilizan el mismo esquema de transporte, las mismas cuadrículas horizontales y verticales, los mismos pasos de tiempo y los mismos esquemas físicos para el transporte a escala de subgrilla (Grell et al., 2005); sin embargo, la inclusión de los módulos de química es computacionalmente mucho más exigente que el uso del modelo sólo con la meteorología. En la Figura 2-1 se muestra un diagrama completo de los procesos necesarios para realizar una simulación con WRF-Chem, los cuales serán abordados en las siguientes secciones.

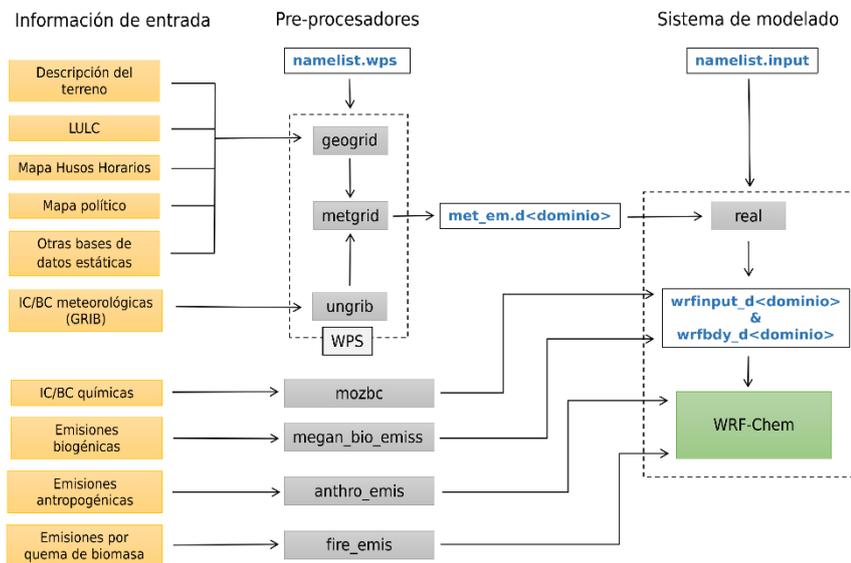


Figura 2-1. Diagrama de los procesos de WRF-Chem. (Elaboración propia)

2.1.1 Modelo WRF

El modelo meteorológico WRF contiene dos motores de cálculo para el cómputo de las ecuaciones atmosféricas: el núcleo *Advanced Research WRF (ARW)* y el núcleo *Nonhydrostatic Mesoscale Model (NMM)*. El ARW es mantenido por el Laboratorio de Meteorología de Mesoescala y Microescala del *National Center for Atmospheric Research (NCAR)* de los Estados Unidos y es orientado a fines investigativos. El núcleo del NMM fue desarrollado por *The National Center for Environmental Prediction* de los Estados Unidos (NCEP) y es utilizado preferentemente en aplicaciones operativas y de pronóstico. Ambos núcleos poseen una arquitectura de software diseñada para permitir la ejecución distribuida o paralela que asegure la escalabilidad del sistema (ver Sección 2.6.3). WRF-Chem está acoplado con WRF-ARW, el conjunto completo de ecuaciones no hidrostáticas de este modelo y sus respectivas derivaciones para la última versión disponible (WRF v4) pueden encontrarse en detalle en Skamarock et al. (2021).

2.1.1.1 Discretización vertical

El modelo WRF (Skamarock et al., 2008) utiliza la presión hidrostática, que sigue el contorno del terreno, como coordenada vertical adimensional, basada en la metodología propuesta por Laprise (1992) y que se define de la siguiente manera para masas de aire seco:

$$\eta = \frac{P_h - P_t}{P_s - P_t} \quad (1)$$

Donde, P_h es la componente hidrostática de la presión en un nivel determinado de la atmósfera; P_s es la presión en la superficie del dominio o área de simulación; P_t es la presión en el límite superior del dominio; y η es la coordenada vertical sigma, que es igual a cero en el límite superior del dominio y aumenta a medida que disminuye la altura, hasta llegar a uno en la superficie. Esta coordenada, denominada η híbrida, reemplaza a la coordenada η tradicional (utilizada en versiones previas a WRFv4), para permitir la eliminación eficiente de la influencia del terreno al aumentar la altura con respecto a la superficie. La Figura 2-2 ilustra la comparación entre ambos sistemas de coordenadas verticales.

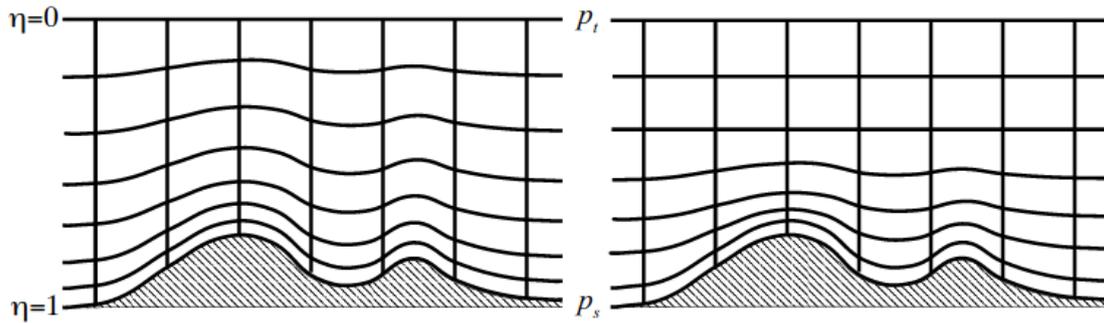


Figura 2-2. Coordenada sigma (η) en WRF-ARW: coordenada η tradicional (Panel izquierdo) y coordenada η híbrida (Panel derecho). (Adaptada de Skamarock et al. (2021))

Usando la coordenada η , el modelo WRF integra un conjunto de ecuaciones diferenciales no hidrostáticas, no lineales y totalmente compresibles, denominadas ecuaciones primitivas. Estas derivan de las leyes fundamentales de la física de la atmósfera y describen el flujo y la transferencia de calor y masa a través de un fluido, permitiendo la modelización la atmósfera húmeda (Skamarock & Klemp, 2008). Los términos expresados en estas ecuaciones también incluyen componentes de forzamiento relacionadas con proyecciones esféricas, rotación de la tierra, mezclado turbulento y parametrizaciones físicas.

2.1.1.2 Discretización horizontal

El modelo utiliza una cuadrícula de tipo Arakawa-C desplazada (*staggered Arakawa*) para realizar la discretización espacial del dominio. Como se muestra en la Figura 2-3, el término θ denota el centro de la celda o centro de masa, allí se calculan variables escalares y variables de diagnóstico tales como la presión, la temperatura y la humedad. Las componentes horizontales (U y V) y vertical (W) del viento se calculan en el centro de los bordes de la celda junto con las demás variables vectoriales.

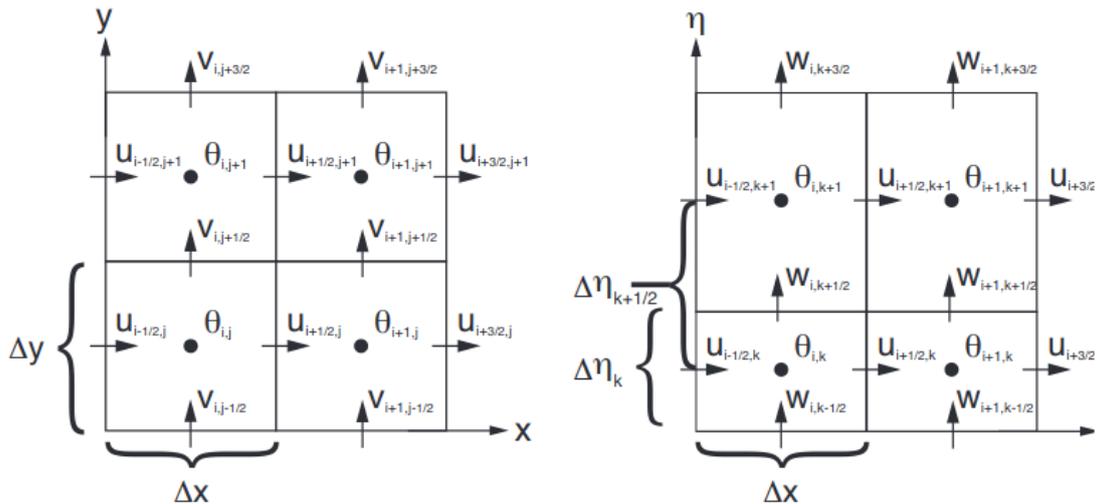


Figura 2-3. Representación de la cuadrícula horizontal (Panel izquierdo) y la cuadrícula vertical (Panel derecho) en WRF-ARW. (Adaptada de Skamarock et al. (2021))

2.1.1.3 Discretización temporal

La discretización temporal del modelo se realiza mediante el esquema de división temporal de tercer orden *Runge-Kutta* descrito por Wicker & Skamarock (2002). Se trata de un conjunto de métodos iterativos, explícitos e implícitos, para la solución numérica de ecuaciones diferenciales. En particular, las ecuaciones no hidrostáticas que se resuelven en WRF incluyen algunos términos responsables de las ondas sonoras y gravitacionales, que se denominan modos rápidos debido a su alta velocidad de propagación (300 a 350 metros/segundo), especialmente en la dirección vertical. Normalmente, la resolución vertical del modelo es mucho más fina que la cuadrícula horizontal y, por lo tanto, intentar resolver todo en el mismo paso de tiempo limitaría el esquema explícito *Runge-Kutta* a pasos de tiempo muy pequeños y sería computacionalmente muy costoso. Para evitar esto y mantener la estabilidad numérica, se utilizan métodos implícitos para resolver los modos rápidos y métodos explícitos para los demás procesos. Mayores detalles acerca de este proceso se dan en la Sección 2.6

2.1.2 Sistema de preprocesamiento de WRF (WPS)

El sistema de preprocesamiento de WRF (WPS: *WRF Preprocessing System*) se ocupa de preparar los datos estáticos y meteorológicos de entrada que se utilizarán para inicializar la simulación. El WPS está compuesto por tres módulos: geogrid, ubgrib y metgrid, las instrucciones necesarias para su ejecución se leen desde el archivo namelist.wps. Este archivo contiene una sección específica para cada uno de los módulos y una sección compartida con parámetros comunes a los tres. La sección compartida permite al usuario definir: los dominios, la duración de la simulación para cada dominio, resolución temporal de los datos de entrada, entre otros parámetros. Los archivos GEOGRID.TBL, METGRID.TBL y Vtable son tablas estándares utilizadas individualmente por los módulos, que

proporcionan un control adicional sobre las operaciones del programa, y generalmente no requieren ser modificadas por el usuario a menos que se precisen ajustes de configuración más avanzados, como los desarrollados en esta tesis. La descripción detallada de las distintas opciones de funcionamiento de WPS se encuentra en el sitio web para usuarios de WRF-ARW: <http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/>.

El módulo geogrid (con su ejecutable geogrid.exe), define el dominio del modelo e interpola los datos terrestres estáticos a este dominio según la información proporcionada en el namelist.wps, es decir, el número de puntos de grilla (oeste-este y norte-sur), la resolución espacial horizontal, proyección del mapa y latitud/longitud de referencia del modelo. La información de entrada de este programa incluye datos de topografía, pendientes del terreno, usos y tipos de suelo, temperatura de las capas internas del suelo, cobertura vegetal de las celdas y albedo, entre otros. Esta información normalmente se descarga directamente de la página de WRF, pero también puede derivarse de otras fuentes e incluirse en el modelo redefiniendo las entradas correspondientes en el archivo GEOGRID.TBL, que es donde se especifican los métodos de interpolación, la ubicación de los archivos fuente y la prioridad de las fuentes de datos (ver Sección 2.1.3.6).

El módulo ungrib (con su ejecutable ungrib.exe) extrae los datos meteorológicos del formato binario GRIB (*General Regularly-Distributed Information in Binary*), con la ayuda de una tabla de variables predefinidas (Vtable) que permite extraer sólo las variables necesarias para inicializar el modelo (p. ej., la temperatura, los vientos, la humedad relativa, altura sobre el nivel del mar, la presión en superficie, las propiedades del suelo y el paisaje) y luego guarda los datos en un formato intermedio.

Los archivos en formato GRIB utilizados para generar las condiciones iniciales y de contorno (IC/BC) meteorológicas, usualmente provienen de modelos globales con resoluciones más gruesas, como el Sistema Global de Predicción (GFS). Este modelo extrae información meteorológica observada del Sistema Global de Asimilación de Datos (GDAS), que recopila continuamente datos de observación del Sistema Global de Telecomunicaciones (GTS), y de otras fuentes, para colocarla en un formato de cuadrícula con el fin de inicializar las previsiones meteorológicas de WRF con datos observados. Los archivos GRIB son preparados operativamente por el GFS cada seis horas en apoyo de las necesidades críticas de previsión meteorológica. El análisis global operativo final (FNL) utiliza el mismo modelo que el GFS, pero prepara archivos que se inician aproximadamente una hora después del GFS, con el fin de incorporar una mayor cantidad de datos observados, recolectando también los datos que no alcanzaron a ser incluidos una hora antes en el análisis del GFS.

Por último, el módulo metgrid (metgrid.exe) combina las salidas de geogrid y ungrib, e interpola horizontalmente los campos meteorológicos con formato intermedio de ungrib al dominio de simulación definido en geogrid. Esta información se introduce finalmente en el programa real.exe

para generar las IC/BC meteorológicas que utilizará el modelo WRF, además de utilizarse para la preparación de las emisiones y la inicialización de los campos químicos.

2.1.3 Configuración regional de WPS

Las condiciones representativas de la superficie del terreno se obtienen de bases de datos estáticas y se incorporan al modelo a través del WPS. Existe una configuración por defecto de WRF para modelar cualquier región del planeta utilizando bases de datos globales, que generalmente se derivan de observaciones por satélite y sólo proporcionan información hasta una resolución de 2 arcmin (aprox. 3.7 km en el ecuador). En la medida de lo posible, el modelo WRF debe configurarse en función de las características particulares de la zona y el caso de estudio, por lo que es posible y recomendable diseñar configuraciones avanzadas que permitan incluir datos sobre las características particulares de una determinada zona de estudio con la mejor resolución espacial disponible.

Trabajos anteriores del grupo GEAA-UTN desarrollaron y actualizaron los datos de entrada estáticos de WRF predeterminados para Argentina, con mapas en alta resolución para mejorar la representación de campos como la elevación del terreno, el tipo y uso del suelo (Cremades, 2017; Cremades et al., 2011; Fernandez et al., 2010; Mulena et al., 2016; Puliafito et al., 2015). También se han incorporado nuevas variables al WPS para incluir mapas de divisiones políticas y zonas horarias (Fernandez et al., 2017; Schiavone, 2018), que son necesarias para el redimensionamiento espacial de las emisiones antropogénicas (ver Capítulo 3). Dichas modificaciones fueron implementadas en versiones anteriores de WRF y, en esta sección se presenta una descripción de las modificaciones realizadas junto con el correspondiente procedimiento de adaptación a la versión WRF-Chem v4, que es la utilizada en esta tesis.

2.1.3.1 Topografía

La representación de la elevación del terreno por defecto de WRF se actualizó con la información proporcionada por la *Shuttle Radar Topography Mission* (SRTM3, Rodríguez et al., 2005). Esto mejora la elevación del terreno hasta una resolución espacial de 3" × 3" (90 m × 90 m) y permite reducir los errores asociados a las perturbaciones topográficas mediante una descripción más precisa del terreno con topografía compleja como ocurre en la región central de la cordillera de los Andes (Cremades, 2017).

2.1.3.2 Uso y cobertura del suelo (LULC)

Estudios previos han demostrado que la información de LULC en Argentina no está correctamente representada por las bases de datos globales del modelo WRF (Cremades, 2017). Por lo tanto, se desarrolló una configuración optimizada para la base de datos estática, que proporciona información

más detallada sobre la distribución espacial de las categorías nacionales de uso del suelo. Esta configuración se construyó a partir del mapa de uso del suelo GlobCover 2009 de la Agencia Espacial Europea (ESA) (Arino et al., 2012; Bontemps et al., 2011), con una resolución horizontal de 300m y se complementó con información proporcionada por el Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria (INTA) y Universidades nacionales.

Los datos del producto satelital *Earth at Night* (Puliafito et al., 2015), se utilizaron para ajustar la representación de las zonas urbanas. Esto es de especial importancia, ya que una caracterización adecuada de la superficie urbana, que distinga entre zonas netamente urbanas y suburbanas con mayor precisión, puede influir en las estructuras y circulaciones térmicas atmosféricas, en la dinámica de la capa límite planetaria (PBL) y en las precipitaciones. Esto, a su vez, puede tener un profundo impacto en la calidad del aire ya que modifica el transporte, las transformaciones químicas y la eliminación de contaminantes en la PBL (Li et al., 2016).

El programa geogrid del WPS, interpola las categorías de uso de suelo a partir de dos clasificaciones diferentes. La clasificación MODIS-IGBP (*Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer - International Geosphere Biosphere Programme*), que cuenta con 21 categorías (opción por defecto en WRF actualmente), pero solo puede ser utilizada con el modelo de superficie terrestre Noah LSM (ver Sección 2.2.5); y la clasificación USGS (Servicio Geológico de los Estados Unidos), que tiene una resolución de 30" y con caracterización basada en 24 categorías, las cuales pueden usarse con las demás parametrizaciones de superficie.

El mapa construido con la configuración refinada para LULC de Argentina se reclasificó según las categorías de USGS, que se prefirió sobre MODIS-IGBP para garantizar una mayor compatibilidad con las diferentes parametrizaciones de superficie. A esta configuración se le denominó USGS/GEAA La Figura 2-4 muestra el mapa de uso del suelo de USGS/GEAA aplicado a un dominio de simulación de alta resolución (1.3 km x 1.3 km) que contiene a la ciudad de Buenos Aires, donde puede verse claramente que tanto los límites de la ciudad como la variabilidad entre categorías rurales en la periferia de la ciudad están mejor representadas en USGS/GEAA. Este dominio forma parte del caso de estudio sub-regional presentado en el Capítulo 5.

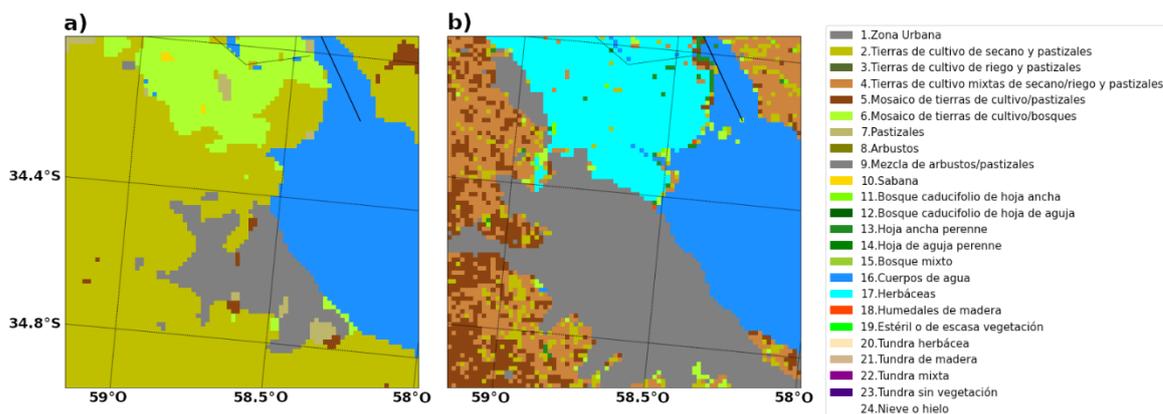


Figura 2-4. a) Configuración de LULC según las 24 categorías del USGS, en el dominio de mayor resolución presentado en el Capítulo 5 (d03: 1.3 x1.3 km) para Buenos Aires. a) LULC por defecto de WRF, b) LULC Argentina (USGS/GEAA). (Elaboración propia)

2.1.3.3 Tipos de suelo

La base de datos de tipos de suelo es la que controla la conductividad térmica y la porosidad del suelo, entre otras cosas. La representación de los tipos de suelo por defecto de WRF se actualizó utilizando el inventario de clasificación de los suelos y evaluación de las tierras de Argentina (Cremades et al., 2011; Cruzate et al., 2013). Este inventario fue vectorizado a partir de los mapas provinciales contenidos en el Atlas de suelos de la República Argentina (INTA, 1990). Con esta información se generó un mapa de 500m de resolución y se actualizaron los datos de entrada de WRF para las variables de WPS: **SOILCTOP** y **SOILCBOT** (ver Sección 2.1.3.6).

2.1.3.4 Mapa político

La herramienta **anthro emis** es ampliamente utilizada para transformar inventarios de emisiones globales en un formato legible por el modelo WRF-Chem (ver Capítulo 3). Esta herramienta ha sido modificada para incluir inventarios de emisiones que puedan proceder de diferentes bases de datos con distintas resoluciones espaciales. Esto permite que, por ejemplo, en el caso de que el dominio de simulación incluya territorios de dos países diferentes, se puedan considerar en el mismo archivo de emisiones la información en alta resolución de ambos países, si es que esta se encuentra disponible.

Para obtener las emisiones de un país en particular, la herramienta **anthro emis** utiliza una nueva variable denominada **POLIT_MAP**, desarrollada para asignar un índice a cada país por división política (Figura 2-5a). Esto permite seleccionar el país deseado por su índice y en cada celda del archivo de entrada de emisiones, sólo se considerarán las emisiones producidas en el territorio político al que pertenece la celda. El mapa político se incluye en el modelo a través del WPS, utilizando la herramienta **geogrid** para adaptarlo al dominio de simulación.

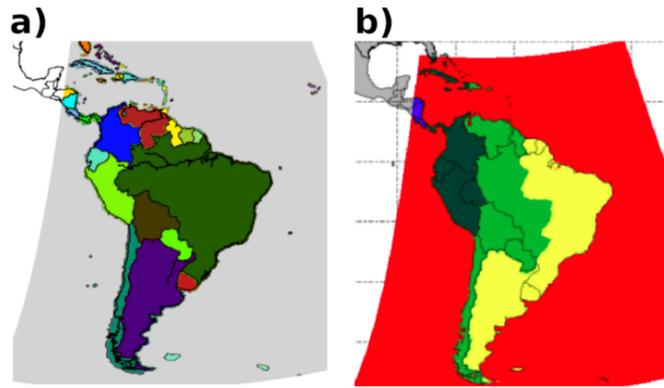


Figura 2-5. Mapas implementados en WPS para un dominio de simulación de Sudamérica: a) Mapa político, las diferencias de color están representadas por valores numéricos, que difieren de un país a otro. b) Mapa de husos horarios, las diferencias de color están representadas por valores numéricos según cada zona horaria (amarillo: UTC-3; verde claro: UTC-4; verde oscuro, UTC-5). (Elaboración propia)

2.1.3.5 Zona Horaria

Una simulación regional puede incluir dominios compuestos por varios países o regiones muy grandes que cuentan con al menos dos husos horarios en su territorio. Este es el caso de países de grandes extensiones en longitud (p. ej., Brasil, Estados Unidos, Canadá) o también de regiones fronterizas muy próximas (p. ej., Santiago de Chile y Mendoza). Dado que el comportamiento de las fuentes de emisión antropogénicas en una región determinada está influenciado por variaciones en las condiciones sociales, económicas, culturales, geopolíticas o de otro tipo, cobra relevancia la consideración del huso horario al que dicha región pertenece. Por este motivo, se incluye en el modelo una nueva variable denominada `TIME_ZONE`, la cual define el huso horario al que pertenece cada una de las celdas del territorio continental mediante un índice numérico (Figura 2-1 y Figura 2-5b). Los valores registrados en el mapa corresponden a la hora local con referencia a la hora del meridiano de Greenwich (GMT). De esta manera, la emisión en cada punto de celda responde tanto al perfil temporal utilizado como a su propio huso horario, permitiendo que el perfil temporal sea similar para todas las celdas pertenecientes a la misma zona horaria.

2.1.3.6 Implementación de las modificaciones en WPS

Como se explicó en secciones anteriores, el módulo `geogrid` del WPS, interpola los datos geográficos estáticos (p. ej., la topografía, el uso de la tierra, el tipo de suelo, etc.), para el dominio principal y todos los dominios anidados seleccionados por el usuario. Previamente a ejecutar el `geogrid.exe` todas las bases de datos estáticas deben estar disponibles y almacenadas dentro de la carpeta `$geog/`, junto con sus respectivos archivos de indexado (`index`) correctamente adaptados al dominio geográfico deseado. A continuación, se describen los pasos a seguir para incluir las modificaciones más relevantes anteriormente mencionadas en WPSv4 y WRF-Chemv4. Para una mejor comparación, los archivos `GEOGRID.TBL` y `METGRID.TBL` (originales y modificados), el `namelist.wps` y la carpeta `$geog_geaa/`

(que contiene las bases de datos estáticas en alta resolución descritas previamente), están disponibles en el repositorio de esta tesis:

Lopez-Noreña, Ana Isabel (2023), "Repositorio de tesis doctoral: Impacto de las emisiones naturales y antropogénicas sobre la calidad del aire regional en Argentina", Mendeley Data, V1, doi: 10.17632/pchm4c6369.1. <https://data.mendeley.com/datasets/pchm4c6369/1>

1. Crear las correspondientes carpetas dentro de la carpeta `$geog/` para cada una de las bases de datos requeridas:
 - Topografía: `$geog/SRTM_90mN/`
 - LULC: `$geog/globcover/`
 - Tipo de suelo: `$geog/soiltype_top_500mts/`, `$geog/soiltype_bot_500mts/`
 - Mapa político: `$geog/political_map/`
 - Zona horaria: `$geog/husos_horarios/`
2. Traducir los datos a un formato binario legible por WPS. Los respectivos mapas deben ser generados como archivos binarios y posteriormente nombrados siguiendo el formato 00001-XXXXX.00001-YYYYY, donde "XXXXX" es el número de puntos de cuadrícula en la dirección X (es decir, las longitudes) y "YYYYY" es el número de puntos de cuadrícula en la dirección Y (es decir, las latitudes). Los archivos deben ubicarse dentro de cada una de las carpetas previamente creadas, donde además deben agregarse los archivos de indexado que se asocian a cada conjunto de datos estáticos. Estos archivos son únicos y definen los parámetros específicos para el conjunto de datos que acompañan. Más información acerca de la conversión de bases de datos a archivos binarios para WPS se puede obtener en el enlace: https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/user_guide_v4/v4.2/users_guide_chap3.html#_Description_of_index.
3. Adaptar la tabla `GEOGRID.TBL`, ubicada dentro de la carpeta `$WPS/geogrid/` para que el programa `geogrid.exe` pueda leer los datos estáticos creados en los pasos anteriores. En esta tabla se describe cómo debe tratar `geogrid` a cada uno de los conjuntos de datos, donde cada entrada de la tabla corresponde a una variable procesada. Cada una de estas variables contiene una especificación en el formato general:

```
RES_STRING : REL_PATH RES_STRING : REL_PATH
```

Donde `RES_STRING` es una cadena de caracteres que identifica la fuente o la resolución de los datos de alguna manera única y que puede ser especificada para cada dominio de simulación en la variable `geog_data_res` del archivo `namelist.wps`, y `REL_PATH` es la ruta relativa donde se

encuentran los archivos de los nuevos datos estáticos y los índices correspondientes en un formato legible por el modelo.

- Las variables HGT_M, HGT_U, HGT_V refieren a la topografía interpolada a la retícula M(θ), U y V del modelo (ver Sección 2.1.1.2). Para que se pueda tomar la base de datos de alta resolución es necesario agregar la siguiente línea en la sección de **GEOGRID.TBL** correspondiente a cada una de las variables:

```
rel_path =      srtm_90:SRTM_90mN/
```

- La variable LANDUSEF contiene la clasificación de los usos de suelo para el modelo. En este caso se agrega en **GEOGRID.TBL** una nueva categoría completa con **priority=2**, esta variable indica que el modelo tomará por defecto la nueva base de datos en alta resolución USGS/GEAA para todas las futuras simulaciones.

```
=====
name=LANDUSEF
  priority = 2
  dest_type = categorical
  z_dim_name = land_cat
  interp_option = default:nearest_neighbor
  abs_path = default:globcover/
=====
```

- Las variables SOILCTOP y SOILCBOT contienen las características del suelo para la superficie y el nivel más profundo (respectivamente) con porcentajes para cada categoría. Para que puedan tomar la información en alta resolución por defecto se agrega en **SOILCTOP**:

```
rel_path =      500mts: soiltype_top_500mts/
```

y en **SOILCBOT**:

```
rel_path =      500mts: soiltype_bot_500mts/
```

En el caso del mapa político y la zona horaria, es necesario crear en **GEOGRID.TBL**, dos nuevas variables asociadas **POLIT_MAP** y **TIME_ZONE**, de la siguiente manera:

- **name**, define el nombre del campo que va a ser producido por el programa **geogrid.exe**.

- `priority`, permite priorizar entre diferentes fuentes de datos para el mismo campo (a mayor número mayor prioridad).
- `dest_type`, indica a `geogrid.exe` si el campo a interpolar es un campo continuo que puede tomar cualquier valor real o un campo categórico/discreto que sólo puede tomar valores enteros.
- `z_dim_name`, se utiliza si se procesa un campo que tiene varios niveles verticales.
- `interp_option`, especifica diferentes opciones de interpolación para aplicar a la base de datos en la respectiva cuadrícula del modelo.

```

=====
name=POLIT_MAP
  priority = 1
  dest_type = categorical
  dominant_only = POLIT_MAP
  z_dim_name = polit_cat
  fill_missing = 0.
  interp_option = default:nearest_neighbor
  abs_path = default:political_map/
=====
name=TIME_ZONE
  priority = 1
  dest_type = categorical
  dominant_only = TIME_ZONE
  z_dim_name = zone_cat
  fill_missing = 0.
  interp_option = default:nearest_neighbor
  abs_path = default:husos_horarios/
=====

```

4. Finalmente, en el archivo `namelist.wps`, en la sección `&geogrid`, se debe especificar la ubicación de la `GEOGRID.TBL` modificada y las bases de datos que no fueron configuradas como variables por defecto. Esto se hace para cada uno de los dominios en la variable `geog_data_res`, como se muestra a continuación:

```

geog_data_res= 'srtm_90+usgs_5m+nesdis_greenfrac+usgs_lakes+nesdis_greenfrac+5m',
               'srtm_90+usgs_2m+usgs_lakes+nesdis_greenfrac+2m',
               'srtm_90+usgs_lakes+usgs_30s+nesdis_greenfrac+30s'

```

```

opt_geogrid_tbl_path = 'ruta completa al directorio con la nueva GEOGRID.TBL'

```

Una vez realizado el procedimiento descrito anteriormente, se puede continuar con la generación de los ficheros meteorológicos con las modificaciones incluidas, siempre teniendo en cuenta utilizar los correspondientes `GEOGRID.TBL` y `namelist.wps` actualizados por el usuario.

demás ajustes. Los esquemas de radiación son llamados en primera instancia para obtener los flujos radiativos (`$WRF/phys/module_radiation_driver.F`). Las variables de convección (`$WRF/phys/module_cumulus_driver.F`) y microfísica (`$WRF/phys/module_microphysics_driver.F`), son tomadas del paso de ejecución anterior y se recalculan al final del paso de tiempo actual (Skamarock & Klemp, 2008). Por último, el esquema de PBL (`$WRF/phys/module_pbl_driver.F`) toma los flujos de calor y humedad a partir de los procesos de superficie. A continuación, se presenta una breve síntesis de las principales parametrizaciones físicas utilizadas en este estudio, las cuales deben preestablecerse con anterioridad a la selección de los esquemas químicos. Para una descripción más detallada sobre los diversos procesos físicos parametrizados y sus interacciones ver Stensrud (2007).

2.2.1 Parametrización de radiación

Los esquemas de radiación proporcionan estimaciones para simular la transferencia de calor producida por la radiación de onda corta (SW), que incluye las longitudes de onda visibles y circundantes del espectro solar, y por la radiación de onda larga (LW), producida por los gases atmosféricos, las nubes y la superficie del suelo.

En WRF los flujos radiativos SW y LW son calculados por esquemas independientes. Estos esquemas requieren información de las variables de estado tales como: temperatura potencial, vapor de agua, nubosidad y precipitación, y de los esquemas de superficie de donde toman datos de emisividad y albedo. A partir de esta información, tanto SW como LW se calculan como esquemas de columnas independientes (unidimensionales), donde los flujos radiativos corresponden a los de planos paralelos, infinitos y uniformes. La suposición de los planos paralelos permite obtener un buen resultado, siempre y cuando el grosor vertical de las capas del modelo sea mucho menor que la longitud de cuadrícula horizontal (Skamarock & Klemp, 2008). Esto implica que los errores de radiación pueden ser más significativos para dominios con un tamaño de cuadrícula horizontal inferior a 1km (Stensrud, 2007).

La Tabla 2-1 presenta los esquemas de radiación LW y SW comúnmente utilizados para el modelo WRF. Siguiendo la recomendación de investigaciones anteriores en Argentina (Cremades, 2017; Mulena, 2017), se ha seleccionado el esquema RRTM (*The Rapid and accurate Radiative Transfer Model*, (Iacono et al., 2008; Mlawer et al., 1997) para la presente tesis. En este esquema, los flujos y las tasas de enfriamiento pueden calcularse en dieciséis bandas contiguas en la onda larga. Además, la transferencia de radiación se calcula mediante el método de correlación, con distribuciones tomadas de un transporte radiativo detallado línea por línea, destacado por una mayor velocidad computacional. Otra versión del esquema también se ha desarrollado para el espectro de SW.

El RRTMG es una versión más reciente del esquema RRTM, que incluye métodos para el cálculo de la superposición aleatoria de nubes (Pincus et al., 2003). Esta versión optimiza la velocidad de los cálculos, pero es más costosa en términos computacionales. En particular, para SW es una de las dos configuraciones que permite incluir el efecto directo de los aerosoles en WRF-Chem, esto resulta especialmente importante para la modelización de la calidad del aire. Una descripción más detallada de estos esquemas puede encontrarse en http://rtweb.aer.com/rrtm_frame.html.

Tabla 2-1. Esquemas de radiación de onda larga y onda corta comúnmente utilizados en WRF

Esquema	Tipo de Radiación	Bandas espectrales	Interacciones	Referencias
RRTM	LW	16	CO ₂ , O ₃ , nubes	Mlawer et al. (1997)
GFDL	LW	14	CO ₂ , O ₃ , nubes	Fels & Schwarzkopf (1975)
CAM	LW	2	CO ₂ , O ₃ , nubes	Collins et al. (2004)
RRTMG	LW	16	CO ₂ , O ₃ , nubes	Iacono et al. (2008)
Goddard	LW	10	CO ₂ , O ₃ , nubes	Chou & Suarez (2001, 1994)
Dudhia (MM5)	SW	1	nubes	Dudhia (1996)
Goddard	SW	11	CO ₂ , O ₃ , nubes	Chou & Suarez (1994, 2001)
GFDL	SW	12	CO ₂ , O ₃ , nubes	Lacis & Hansen (1974)
CAM	SW	19	CO ₂ , O ₃ , nubes	Collins et al. (2004)
RRTMG	SW	14	CO ₂ , O ₃ , nubes	Iacono et al. (2008)

2.2.2 Parametrización de cúmulos

Los esquemas de cúmulos en WRF representan las nubes de convección profunda y proporcionan la contribución convectiva de la precipitación para la superficie, interactuando también con la radiación y la microfísica. Dichos esquemas determinan cuándo activar una columna convectiva y a qué velocidad hacer que la convección actúe y se elimine la inestabilidad.

En cuadrículas de alta resolución ($dx < 3\text{km}$), la parte dinámica del modelo puede resolver explícitamente las corrientes ascendentes (impulsadas por flotabilidad) y las corrientes descendentes (impulsadas por la evaporación de la lluvia). Por lo tanto, entre la dinámica y la microfísica se encargan de resolver todo el sistema convectivo, sumándole a esto la subsidencia (principal efecto de calentamiento en la columna) para compensar el flujo de masa. Por otro lado, los esquemas parametrizados de cúmulos deben utilizarse para las cuadrículas de resolución más gruesa ($dx > 10\text{k}$) para que puedan contener completamente las nubes convectivas y la subsidencia compensatoria en la misma celda (Skamarock et al., 2008; Stensrud, 2007). Para cuadrículas en el rango entre 3 y 10 km, conocido como “la zona gris”, existe un problema de separación de escalas en el que las corrientes ascendentes no están completamente dentro de la misma celda, incluyendo la zona de subsidencia. El esquema Grell 3D (Grell & Dévényi, 2002) empleado en esta tesis, ofrece una opción de advección de cúmulos que permite propagar la subsidencia a las columnas vecinas solucionando dicho problema.

Finalmente, la interacción de la parametrización de cúmulos con la radiación solamente está disponible para algunos de los esquemas de cúmulos (ver Tabla 2-2) utilizando la opción `cu_rad_feedback = 'True'`. Esta permite proporcionar información de la fracción de nube y cantidad de radiación para las columnas convectivas activas, posibilitando que la radiación pueda “ver” las nubes convectivas dentro de los cálculos.

Tabla 2-2. Esquemas de cúmulos que permiten interacción con la radiación en WRF

Esquema	Referencia
Kain-Fritsch scheme	(Kain, 2004)
Multi-scale Kain-Fritsch scheme	(Zheng et al., 2016)
Grell-Devenyi (GD)	(Grell & Dévényi, 2002)
Grell 3D	(Grell & Dévényi, 2002)
Grell-Freitas (GF)	(Grell & Freitas, 2014)

2.2.3 Parametrización de microfísica de nubes

El esquema de microfísica se encarga de resolver explícitamente los procesos internos de las nubes, proporcionando información acerca de tendencias de calor, humedad atmosférica, cambios de fase del agua y precipitación resuelta a nivel de superficie. Los tipos de partículas que generalmente se consideran en estos esquemas son: agua de nubes, gotas de lluvia, hielo, cristales, nieve y granizo solido/blando. Estas partículas se distinguen por su tamaño y densidad, la masa total de la microfísica contribuye a la dinámica, por lo que hay una retroalimentación de ambos procesos a través de la carga líquida.

La microfísica también interactúa con la radiación, proporcionando el tamaño de las partículas al esquema radiativo para simular, con mayor precisión, la interacción con las nubes. Dentro de estos esquemas se realizan dos tipos de suposiciones sobre la distribución de tamaños de las partículas. Los esquemas que asumen una función de distribución única para los tamaños (p. ej., Log-normal, Gamma, etc.), se denominan parametrizaciones *bulk* (de conjunto). Por otro lado, los esquemas que dividen el rango total de tamaños en diferentes intervalos, asignando un tipo de partícula diferente para cada tamaño, se denominan parametrizaciones *bin* (de segmentos). Estos últimos son principalmente utilizados para fines de investigación y no de pronóstico puesto que añaden al cálculo un gran número de variables y por ende son computacionalmente costosos.

Los esquemas de la microfísica en WRF (tanto en NMM como en ARW) trabajan con base en las parametrizaciones *bulk* y corresponden a dos tipos:

- De un momento (*single-moment*), que sólo predicen razones de mezclado (masa de las partículas por masa de aire seco, kg/kg) y la distribución del tamaño de las partículas se deriva de parámetros fijos.
- De dos momentos (*double-moment*), que predicen razones de mezclado y concentración de partículas (cantidad de partículas por masa de aire, #/kg), de manera que permiten predecir el número de partículas por cada rango de tamaño. Estos se ajustan a un rango de condiciones ambientales más amplio y por lo general pronostican mejor la precipitación acumulada y las propiedades de la distribución de granizo en la nube, que son fundamentales para la predicción de tormentas (Stensrud, 2007).

En esta tesis se utilizó el esquema Eta-Ferrier, que es un esquema *bulk*, sencillo pero eficaz con procesos de diagnóstico de fase mixta.

2.2.4 Parametrización de PBL

Los esquemas PBL parametrizan la capa de la atmósfera situada inmediatamente por encima de la superficie. Esta proximidad a la superficie da lugar a fluctuaciones turbulentas en el movimiento de las partículas y gases que componen el aire, lo que hace que esta región de la atmósfera tenga una gran capacidad de mezcla. El objetivo de estos esquemas es distribuir los flujos turbulentos de calor y humedad a lo largo de la columna vertical, calcular las velocidades de fricción de la superficie, calcular los coeficientes de intercambio y simular algunos parámetros característicos de la PBL como capa intermedia entre la superficie del suelo y la atmósfera libre. Por lo tanto, el esquema de PBL está estrechamente relacionado con las parametrizaciones de superficie (ver Figura 2-7) (Skamarock et al., 2008).

En WRF existen dos tipos de esquemas de PBL:

- Esquemas de predicción de energía cinética turbulenta (esquemas TKE - *Turbulent Kinetic Energy schemes*), que relacionan los flujos turbulentos a diferentes alturas en la PBL con los gradientes verticales de las variables a la misma altura.
- Esquemas no locales de diagnóstico, que calculan explícitamente la TKE, estimando los flujos turbulentos en determinados puntos de la columna vertical a partir de los perfiles medios de todo el dominio de mezcla turbulenta.

Por encima de la PBL todos estos esquemas también hacen difusión vertical debido a la turbulencia. Hay dos esquemas de PBL particularmente adecuados para usar con WRF-Chem: Mellor-Yamada-Janjic (MYJ) (Janjić, 2001) (esquema TKE) y el esquema de la Universidad de Yonsei (YSU) (Hong & Lim, 2006) (esquema no local). En esta tesis se utiliza el esquema YSU que fue seleccionado tomando como

referencia configuraciones del modelo WRF previamente empleadas en investigaciones realizadas en Argentina (Mulena et al., 2016; Puliafito et al., 2015).

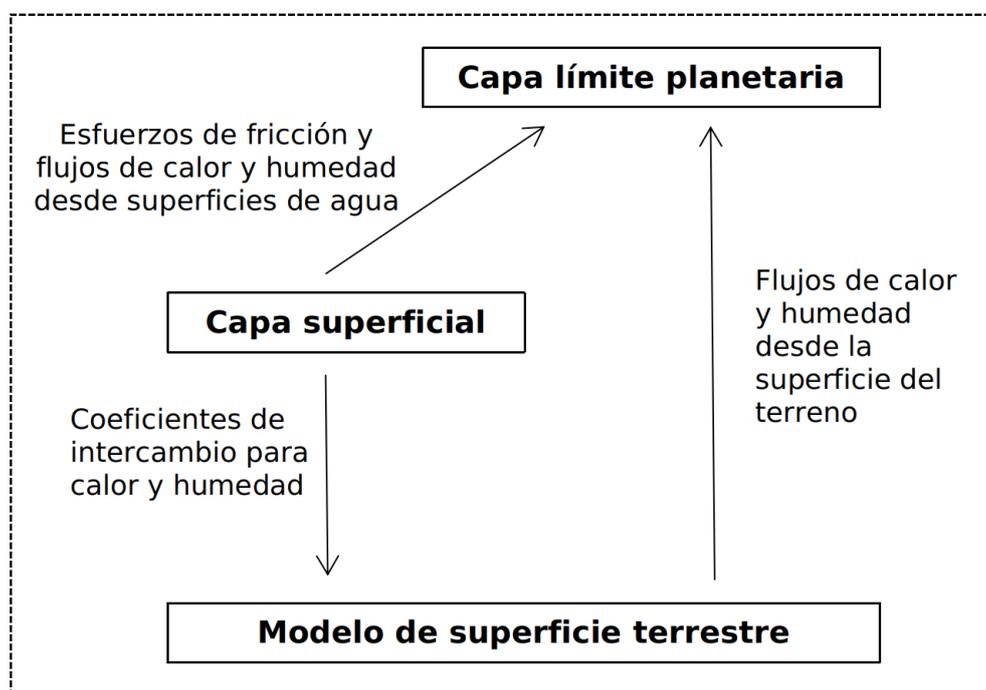


Figura 2-7. Interacción entre las parametrizaciones de superficie y el esquema de PBL. (Elaboración propia)

2.2.5 Parametrización de superficie

La parametrización de superficie se divide en dos partes, el modelo de capa superficial y el modelo de superficie terrestre (LSM, *Land Surface Model*). Específicamente, el modelo de capa superficial utiliza la teoría de la similaridad de Monin-Obukhov (Monin & Obukhov, 1954) para proporcionar los coeficientes de intercambio a los LSM, proporcionar la velocidad de fricción al esquema de PBL y proporcionar los flujos superficiales sobre los puntos de cuadrícula sobre el agua donde el modelo de superficie terrestre no opera. Los procesos físicos del modelo de capa superficial están estrechamente relacionados con el esquema de PBL (ver Figura 2-7), por lo que en WRF, cada esquema de capa superficial está relacionado con un esquema de PBL específico. En esta tesis se utiliza el modelo de capa superficial MM5, que se basa en las funciones de estabilidad desarrolladas por Paulson (1970), este modelo puede utilizarse en conjunto con el esquema de PBL YSU.

Los modelos LSM, por su parte, interactúan con las demás opciones físicas del modelo, las precipitaciones del esquema de microfísica y cúmulos manejan la humedad de la superficie y del suelo, y la radiación maneja el balance de energía. La salida de estos modelos son los flujos superficiales (el flujo de calor latente/sensible) y los efectos en el momentum a través de la fricción. De este modo,

proporciona las condiciones de contorno de la parte inferior de la atmósfera para la PBL y determina las condiciones de transporte vertical en WRF. Por otro lado, el viento desempeña un papel fundamental, afectando el intercambio de momento, calor y humedad entre la superficie terrestre y la atmósfera. El viento induce turbulencia, facilitando la mezcla vertical e influenciando procesos como la evapotranspiración, advección y desarrollo de la capa límite (Skamarock et al., 2008).

Entre los LSM se manejan diferentes grados de complejidad, yendo desde un esquema básico como lo es el 5-layer (Dudhia, 1996), para casos idealizados; donde no hay predicción de la vegetación, ni de la cubierta de nieve, sólo difusión térmica en las capas del suelo, hasta esquemas más complicados como Noah, RUC y CLM4. En este trabajo se utiliza el Noah LSM (Chen & Dudhia, 2001) que modela el suelo en 4 capas, hasta una profundidad de 2 metros, portando variables de temperatura, agua y hielo. También puede tener en cuenta los efectos de la vegetación, la emisividad de la superficie y la cubierta de nieve fraccional para proporcionar flujos de calor sensible y latente para el esquema PBL (Skamarock et al., 2008) y tiene la ventaja de ser compatible con las bases de datos de reanálisis de donde se obtienen los archivos GRIB (ver Sección 2.1.2 y <http://rda.ucar.edu>). Adicionalmente, el esquema Noah LSM posibilita el acoplamiento de modelos urbanos que permiten utilizar una variabilidad más compleja entre los tipos de zonas urbanas incluyendo, por ejemplo, parametrización de cañones urbanos, ancho de calles, densidad del dosel urbano, efectos de sombra y reflexión de la radiación de los edificios (Kusaka & Kimura, 2004). Esta opción resulta de gran utilidad para simular la calidad del aire cuando se trabaja con resoluciones finas (< 500 m). Sin embargo, la resolución más fina utilizada en este trabajo es mayor a 1 km (ver Capítulo 5), por lo cual no se utilizó una parametrización del dosel urbano.

2.3 Mecanismos químicos

El acoplamiento de la dinámica atmosférica, el transporte de contaminantes, las reacciones químicas y la composición atmosférica dentro de un único sistema de modelado implica la correcta caracterización de una serie de procesos e interacciones entre la química y la meteorología, que se representan a través de la integración de los esquemas de parametrización física del modelo y los mecanismos químicos. La Figura 2-8 resume las principales relaciones entre la meteorología y la química que deben contemplarse en el modelado de la calidad del aire (Baklanov et al., 2014). La radiación y la temperatura modulan las tasas de reacción química y fotolítica, influyen en la volatilidad de las especies químicas y determinan la dinámica de los aerosoles (coagulación, condensación, nucleación). Los gradientes verticales de temperatura definen la intensidad de la difusión vertical, afectando así a las concentraciones superficiales de contaminantes y al flujo de entrada/salida de la PBL. Los aerosoles y gases radiativamente activos modulan las transferencias radiativas y, por tanto, afectan la fotólisis y los procesos de transformación química. Además, la absorción de la luz solar por los aerosoles provoca cambios en el perfil de la temperatura atmosférica y en la mezcla vertical. Las concentraciones

inusualmente altas de aerosoles pueden afectar a la velocidad del viento e influir en la formación y morfología de las nubes al actuar como núcleos de condensación. Estos cambios en la formación de las nubes influyen en las precipitaciones (ocurrencia e intensidad) así como en la formación de niebla y en la humedad relativa atmosférica. A su vez, la precipitación determina la deposición húmeda de gases y aerosoles. Por último, la parametrización de la superficie terrestre afecta a las emisiones biogénicas y a la deposición seca.

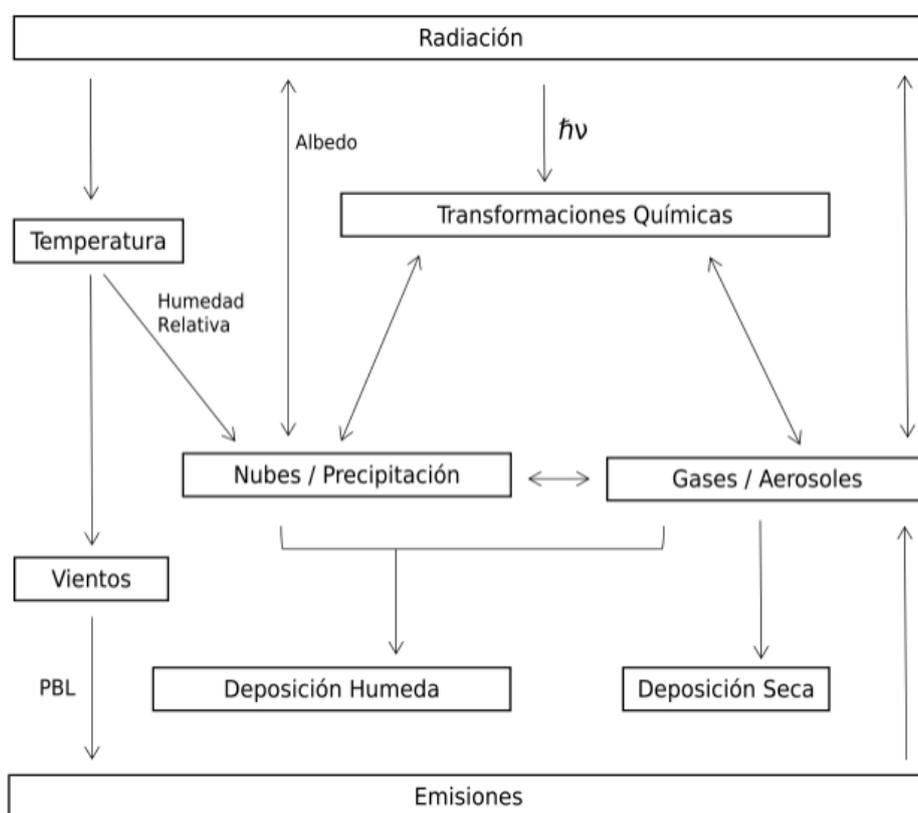


Figura 2-8. Resumen de las interacciones entre la química atmosférica y la meteorología. (Elaboración propia)

La naturaleza *online* del modelo WRF-Chem permite realizar simulaciones considerando tanto los procesos químicos como los meteorológicos de forma unificada, en la misma malla y utilizando un mismo paso de tiempo para la integración. De este modo, se consigue una mejor aproximación a la simulación de las interacciones mencionadas anteriormente. La química atmosférica se incorpora en WRF-Chem a través de tres componentes principales: el mecanismo químico o esquema de fase gaseosa, el esquema de aerosoles y el esquema de fotólisis, que a su vez interactúan con las parametrizaciones físicas descritas en la Sección 2.2.

2.3.1 Esquema de fase gaseosa

Los esquemas de fase gaseosa son módulos utilizados para representar procesos químicos relevantes para la simulación de la química atmosférica. Estos esquemas se desarrollan a partir de mediciones de laboratorio y de campo de diferentes especies químicas, reacciones, constantes de velocidad y datos fotoquímicos. Dichos esquemas se traducen en ecuaciones diferenciales ordinarias que se incorporan a un mecanismo químico y que, finalmente, se resuelven de manera numérica utilizando diferentes métodos (Stockwell et al., 2011).

La Figura 2-9 resume las principales reacciones de la química troposférica básica que se tienen en cuenta dentro de los mecanismos químicos en WRF-Chem. Entre las reacciones fotoquímicas están la formación de O_3 , la fotólisis de NO_2 , y aquellas que involucran aldehídos y cetonas (NMVOCs que contienen el grupo $C=O$). La fotólisis del NO_2 produce oxígeno atómico singlete ($O(^1D)$), que reacciona con el oxígeno molecular (O_2) para formar O_3 . En una troposfera no contaminada (sin NMVOCs), la rápida reacción de NO con O_3 completa el ciclo regenerando una molécula de NO_2 , sin embargo, en un entorno urbano contaminado los radicales peroxi (CH_3O_2 y HO_2), éstos pueden oxidar el NO a NO_2 sin consumir O_3 , compitiendo con la reacción del NO con el O_3 . Cuando intervienen estas reacciones, hay producción de O_3 , pero no eliminación, generando una acumulación y produciendo además otros oxidantes fotoquímicos como contaminantes secundarios.

Dentro de los esquemas químicos, existen reacciones de oxidación que involucran al NO , a los compuestos de azufre y nitrógeno y las moléculas orgánicas con dobles o triples enlaces o átomos de hidrógeno. El radical OH es el principal agente oxidante en la troposfera, el cual se forma a partir de la fotólisis del O_3 y la posterior reacción del $O(^1D)$ con el vapor de agua. Su formación ocurre exclusivamente durante el día y se intensifica cuanto mayor es la cantidad de radiación solar. El OH se destruye mediante una serie de procesos de oxidación, en los que reacciona con muchas de las especies potencialmente oxidables, iniciando así la mayoría de las reacciones de descomposición en la troposfera. Por otro lado, las especies que son solubles en agua o que no pueden oxidarse más, tales como el ácido nítrico (HNO_3), el ácido sulfúrico (H_2SO_4), los ácidos carboxílicos ($RCOOH$) y el CO_2 , vuelven a la superficie a través de diferentes procesos, como por ejemplo la lluvia ácida (precipitación con alta concentración de HNO_3 y H_2SO_4) y/o procesos de deposición seca y húmeda. Finalmente, las moléculas que no sufren ninguna de las transformaciones químicas descritas y no regresan a la tierra, como el N_2O y los CFCs, suelen ser especies inertes en la troposfera que al pasar a la estratosfera sí participan en otros procesos de oxidación y fotólisis, afectando la capa de ozono.

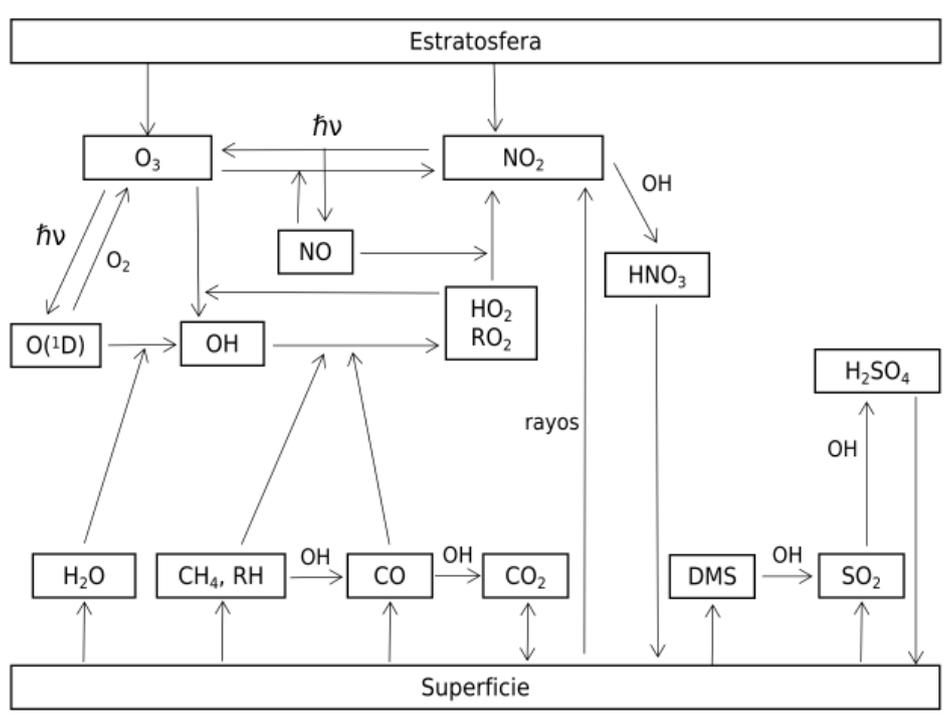


Figura 2-9. Representación simplificada de la química troposférica. (Elaboración propia)

Debido a la complejidad del sistema atmosférico, la mayoría de los modelos utilizan mecanismos químicos reducidos que suelen representar un conjunto simplificado de todas las reacciones químicas que se producen entre las especies en la atmósfera real; en general, el número de especies y reacciones de la química inorgánica atmosférica es manejable desde el punto de vista computacional, por lo que la mayoría de las simplificaciones están relacionadas con la química orgánica. Las diferencias entre los distintos esquemas pueden surgir por variaciones en los mecanismos de oxidación de los NMVOCs, así como diferencias en factores cinéticos (p. ej., para la oxidación de NO y NO_2) (Baklanov et al., 2014). La química orgánica de la troposfera es mucho más compleja, el número y la variedad de sustancias y de reacciones químicas orgánicas hacen prácticamente imposible la simulación explícita de la degradación de los NMVOCs individuales (Goldstein & Galbally, 2007). Cada especie transportada es una variable de pronóstico que hay que calcular explícitamente y añade una ecuación diferencial ordinaria a resolver, de modo que cuanto mayor sea el número de especies, mayor será la demanda computacional (Jacobson, 2005). En consecuencia, se han desarrollado dos métodos principales que buscan agrupar las sustancias orgánicas en clases para reducir el número a un conjunto más manejable de especies y reacciones: la agrupación por enlaces de carbono y la agrupación por moléculas sustitutas.

2.3.1.1 Agrupación por enlaces de carbono

Los NMVOC se descomponen en grupos funcionales (p. ej., grupo carbonilo, grupo carboxilo, doble enlace, triple enlace) y se desarrolla un mecanismo de oxidación para cada uno de esos grupos. El esquema Carbon Bond Mechanism (CBM-IV, Gery et al., 1989) es un ejemplo de ello, en el que los

NMVOCs básicos con pocas moléculas de carbono se modelan explícitamente, mientras que las moléculas más grandes se dividen en moléculas de carbono, basándose en su estructura de enlace (p. ej., carbonos de parafina de enlace simple (PAR: > C <), carbonos de olefina de enlace doble (C=C) o carbono aldehídico (C-CHO)). En este esquema, los alcanos grandes se dividen en el número de PAR igual al número de átomos de C en la molécula y los alquenos grandes se dividen en OLT (terminal) u OLI (interno) según el número de dobles enlaces en la molécula original, con el C restante asignado a PAR. La versión de CBM adaptada a la escala regional en WRF-Chem es CBM-Z (Zaveri & Peters, 1999). En esta versión, se añaden grupos de acetaldehído (ALD2) para representar la química carboxílica, acetonas (AONE), metilglióxido (MGLY) y formaldehído (HCHO). También se añaden especies derivadas de tolueno (TOL) y xileno (XYL) para la química aromática, así como el isopreno (ISOP) como especie independiente.

2.3.1.2 Agrupación por moléculas sustitutas

En estos esquemas, los NMVOCs se agrupan en especies sustitutas que representan clases de compuestos basadas en similaridad de estructuras y reactividades (p. ej., alcanos de cadena corta). El mecanismo asociado a esa molécula es una media ponderada de las moléculas que representa. Por ejemplo, HC₃, HC₅ y HC₈ agrupan los alcanos más grandes dependiendo de la cantidad de carbonos en la cadena y su reactividad; OLT y OLI agrupan los alquenos más grandes diferenciando entre especies de doble enlace terminal o interno (respectivamente); ALD y KET representan todos los aldehídos y todas las cetonas. Las especies más pequeñas y comunes como el metano, etano y eteno son usualmente consideradas de manera explícita (Stockwell et al., 1990, 1997, 2011).

Los esquemas de fase gaseosa que usan esta aproximación en WRF-Chem son *The Regional Acid Deposition Model* segunda generación (RADM-2, Stockwell et al., 1990), *The Regional Atmospheric Chemistry Mechanism* (RACM, Stockwell et al., 1997), el mecanismo del Centro de Investigación de la Contaminación Atmosférica a nivel estatal de 1999 (SAPRC-99, Carter, 2000) y el mecanismo químico asociado con *The Model of Ozone and Related chemical Tracers* (MOZART, Emmons et al., 2010).

El esquema de fase gaseosa MOZART, fue seleccionado para las simulaciones de los casos de estudio sub-regional y regional desarrollados en esta tesis, debido a que el mismo constituye la base que utiliza el modelo global CAM-Chem, del cual se tomaron las IC/BC químicas (ver Sección 2.4, Capítulos 5 y 6). Este esquema incluye 85 especies en fase gaseosa, 12 especies en aerosol, 39 reacciones de fotólisis y 157 reacciones en fase gaseosa. Las constantes de velocidad del mecanismo tal cual está implementado en WRF-Chem v4 se basan en el reporte JPL 2002 (Sander et al., 2003). Además, se incluye un esquema de oxidación de isopreno y un tratamiento diferenciado de los NMVOCs que distingue entre tres especies agrupadas para representar alcanos, una agrupación de alquenos con cuatro o más átomos de carbono, y finalmente un grupo con compuestos aromáticos (BIGALK, BIGENE y TOLUENE); todos junto

con sus respectivos productos principales de oxidación. El mecanismo MOZART también permite el cálculo en línea de las tasas de deposición seca, basado en la parametrización de (Wesely, 1989), que realiza el cálculo de las resistencias superficiales en función de factores como la temperatura de la superficie, la respuesta estomática a los parámetros ambientales, la humectación de las superficies por el rocío y la lluvia, y la cobertura de las superficies por la nieve. Una descripción detallada de todas las especies y reacciones consideradas por MOZART puede encontrarse en Emmons et al. (2010).

2.3.2 Esquema de aerosoles

Los aerosoles atmosféricos son partículas transportadas por el aire que pueden tener un tamaño que va desde unos pocos nanómetros hasta varias micras (Seinfeld & Pandis, 2006). Dichas partículas desempeñan un papel importante en el balance radiativo y el clima de la Tierra, además de ofrecer volúmenes y superficies reactivas en la atmósfera, donde pueden ocurrir reacciones químicas heterogéneas. El tamaño de estas partículas se modifica por diversos mecanismos, como la nucleación, la condensación, la coagulación, la agregación y deposición, que afectan tanto su tiempo de vida en la atmósfera como sus propiedades físicas y químicas (Pal Arya, 1999). Además de sus cambios de tamaño, los aerosoles son física y químicamente bastante complejos, ya que están formados por una gran variedad de compuestos, como sulfato, nitrato, amonio, materiales carbonosos, sal marina y especies de la corteza terrestre (Seinfeld & Pandis, 2006). En consecuencia, la modelización de los aerosoles representa un reto científico y computacional, pues las limitaciones de memoria del ordenador y del tiempo de ejecución de la simulación hacen poco factible representar explícitamente cada una de las especies químicas que constituyen los aerosoles dentro de un mecanismo químico (Zaveri et al., 2008).

Para caracterizar y resolver matemáticamente la distribución de los aerosoles atmosféricos, así como su formación y evolución en función del tiempo y el espacio, se utilizan distintos esquemas de aerosoles. Estos esquemas incluyen, además, procedimientos para simular los diversos procesos químicos y microfísicos implicados mediante la interacción con otros esquemas del modelo, como la radiación y la microfísica de las nubes. El modelo WRF-Chem incluye tres esquemas para el tratamiento de los aerosoles: *The Modal Aerosol Dynamics Model for Europe* (MADE, Ackermann et al., 1998), *The Model for Simulating Aerosol Interactions and Chemistry* (MOSAIC, Zaveri et al., 2008) y *The Goddard Chemistry Aerosol Radiation and Transport model* (GOCART, Chin et al., 2000), que se diferencian principalmente en la descripción de la distribución del tamaño de las partículas. Para las simulaciones realizadas en esta tesis se usaron MOSAIC y GOCART, ya que los mismos pueden acoplarse al esquema en fase gaseosa MOZART. Una descripción breve de las diferencias entre los esquemas de aerosoles se presenta a continuación.

MADE, es un esquema modal (Figura 2-10a) que describe los tamaños de los aerosoles en tres modos o distribuciones log-normales continuas: Aitken, acumulación y grueso (Brasseur & Solomon, 2005). Los

componentes químicos del aerosol se mezclan internamente dentro de cada modo, por lo que resulta eficiente desde el punto de vista computacional.

MOSAIC, es un esquema seccional (Figura 2-10b) en el que la distribución del aerosol se divide en segmentos (*bins*) de tamaño discreto definidos por los diámetros inferior y superior de las partículas secas (la absorción o la pérdida de agua no implica la transferencia de las partículas entre los segmentos). La masa y el número de partículas se simulan asumiendo que cada *bin* está mezclado internamente, de modo que todas las partículas de un *bin* tienen la misma composición química (Zaveri et al., 2008). En WRF-Chem la configuración de MOSAIC se puede utilizar en modo de 4 u 8 *bins*.

GOCART, es un esquema de aerosol en conjunto (*bulk*), mucho más simple que los esquemas seccionales y modales, ya que sólo calcula la masa total de los componentes del aerosol, pero no proporciona información sobre el tamaño y la concentración de las partículas (p. ej., a medida que las partículas crecen, la masa del aerosol aumenta, pero no se sabe cómo cambia su tamaño/número). Sin embargo, es numéricamente muy eficiente y útil cuando la investigación se centra en la química compleja de la fase gaseosa.

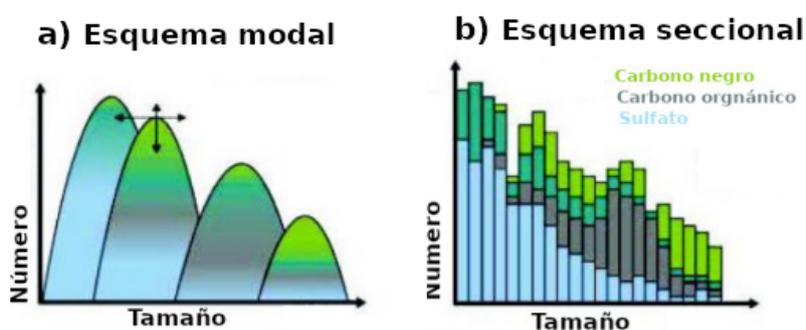


Figura 2-10. Representación gráfica de los esquemas de aerosoles a) modal y b) seccional

2.3.3 Esquema de fotólisis

La radiación solar en las longitudes de onda visibles y ultravioletas puede ser absorbida por distintas moléculas presentes en la atmósfera generando reacciones de fotodisociación (fotólisis). Estas reacciones se ven afectadas por diferentes procesos a nivel atmosférico, así como por la presencia de nubes. En los modelos de química de transporte, los esquemas de fotólisis permiten calcular los coeficientes de fotodisociación que son específicos de cada reacción y dependen de la disponibilidad de la radiación solar en un rango de longitudes de onda específico y un lugar concreto de la atmósfera.

Estos esquemas son esenciales para entender el comportamiento del ozono, los tiempos de vida atmosféricos para otros gases (p. ej., CO, CH₄, hidrocarburos no metánicos) y la formación de oxidantes atmosféricos (Madronich & Flocke, 1999). En el modelo WRF-Chem hay cuatro opciones de esquemas de fotólisis para calcular de manera *online* las frecuencias de fotólisis para las reacciones de

fotodisociación en fase gaseosa: F-TUV, TUV, New-TUV y Fast-J. Todas ellas se basan en Madronich (1987) y Wild et al. (2000), y las diferencias radican en el tratamiento que cada esquema aplica a las propiedades ópticas de las nubes, los aerosoles y otros gases de la atmósfera, lo que se traduce en una disminución o aumento del tiempo de cálculo. En esta tesis las constantes de fotólisis son calculadas de acuerdo con el esquema Fast-J (Wild et al., 2000).

2.3.4 Especiación química en WRF-Chem

Generalmente la especiación de los inventarios de emisiones, tanto globales como regionales (ver Capítulo 3), esta ordenada siguiendo una serie de grupos químicos que suelen ser distintos a los utilizados por los mecanismos químicos de los modelos. Por lo tanto, la implementación de estos inventarios de emisión en WRF-Chem requiere que los datos de entrada se acoplen de forma coherente con la configuración química deseada, de modo que el formato en el que se proporcionan las emisiones al modelo sea compatible con el esquema químico seleccionado. Como parte del preprocesamiento de las emisiones, se debe realizar la asociación necesaria entre las especies del inventario y las especies consideradas en el mecanismo químico, utilizando mapas de especiación, los cuales varían en función de los requisitos de cada mecanismo químico. En el transcurso de esta tesis fue necesario desarrollar mapas de especiación que permitieran adaptar las especies de aerosoles y NMVOCs para varios de los mecanismos químicos incluidos en WRF-Chem mediante factores porcentuales de conversión específicos. Este procedimiento es especialmente importante en el caso de los NMVOCs, ya que estas sustancias se presentan en los inventarios de emisiones como una sola emisión total que agrupa varias especies químicas y que requiere ser distribuida para poder ser introducida y considerada por cada una de las reacciones individuales incluidas en el mecanismo químico.

A continuación, se describe el procedimiento de mapeo utilizado para los esquemas MOZART, RADM-2 y CBMZ (para una descripción más detallada, ver el trabajo de Lopez Noreña et al., 2019a citado en el Anexo A.3.2). Los casos de estudio presentados en esta tesis fueron simulados con el esquema MOZART-GOCART, sin embargo, en el marco del desarrollo de la tesis, se realizaron múltiples simulaciones probando otras configuraciones (como RADM-2 y CBM-Z), cuyos resultados fueron muy útiles para el desarrollo y conclusión de las tesis doctorales de otros miembros del grupo de investigación GEAA-UTN (Bolaño-Ortiz, 2019; Pascual, 2019). Una breve descripción de estas colaboraciones se presenta en el Anexo A.

2.3.4.1 Especiación para gases

Los NMVOCs y los óxidos de nitrógeno (NO_x) son los dos grupos principales de especies gaseosas que requieren ser redistribuidos para ser ingresados al modelo. Las demás especies gaseosas son asignadas uno a uno con su correspondiente especie en el mecanismo, sin necesidad de aplicar ningún factor

porcentual. Las emisiones de óxidos de nitrógeno provienen principalmente de las actividades de combustión (p. ej., vehículos y centrales eléctricas) (Carslaw, 2005; Tuccella et al., 2012). Teniendo en cuenta que WRF-Chem considera las emisiones de NO_x como especies separadas (NO+NO₂), se asigna los porcentajes de 90% y 10% de la cantidad total de NO_x a las especies de NO y NO₂ respectivamente (Carslaw, 2005; Tuccella et al., 2012; Visser, 2016).

La estimación de los factores de especiación para NMVOCs con el mecanismo MOZART se realizó siguiendo a Emmons et al. (2010) y en base a las equivalencias propuestas por ese trabajo y por Zaveri & Peters (1999) fue posible obtener también las tablas correspondientes para CBM-Z y RADM-2. Algunas especies son equivalentes entre los tres mecanismos químicos y sólo difieren en el nombre que se les asigna dentro del modelo WRF-Chem. Para estas especies, se adjudican directamente los porcentajes estimados para el esquema MOZART. En las demás especies, los factores porcentuales se calculan teniendo en cuenta la similitud en la reactividad, el peso molecular y las analogías entre los mecanismos químicos. Las tablas a continuación muestran los factores de especiación finales para MOZART (Tabla 2-3), CBM-Z (Tabla 2-4) y RADM-2 (Tabla 2-5), junto con una breve descripción y la fracción (relativa a la unidad) del total de NMVOCs que representa cada especie. Hay que tener en cuenta que las cantidades de isopreno y monoterpeno emitidas a la atmósfera proceden en su mayoría de fuentes biogénicas y que esta especiación está diseñada para su aplicación a fuentes antropogénicas introducidas en WRF-Chem a través de la herramienta anthro_emis (ver Capítulo 3). Por lo tanto, estas especies no tienen un porcentaje asignado de NMVOCs antropogénicos aquí. Además, nótese que una variable puede tener el mismo nombre en diferentes mecanismos y aun así no corresponder a la misma especie, como en el caso de ETH que en RADM-2 corresponde a etano y en CBM-Z a eteno.

Tabla 2-3. Factores de especiación para el esquema de fase gaseosa MOZART en WRF-Chem

Especie en MOZART	Masa molar (g/mol)	Descripción	Fración del total de NMVOCs (relativa a la unidad)
BIGALK	72.15 (Basado en C ₅ H ₁₂)	C ₅ H ₁₂ agrupación de alcanos C > 3	0.504
BIGENE	56.11 (Basado en C ₄ H ₈)	C ₄ H ₈ agrupación de alquenos C > 3	0.049
C ₃ H ₆	42.08	Propeno	0.019
C ₃ H ₈	44.09	Propano	0.055
C ₂ H ₄	28.05	Eteno	0.047
C ₂ H ₅ OH	46.07	Etanol	0.035
C ₂ H ₆	30.07	Etano	0.051
CH ₂ O	30.03	Formaldehído	0.007
CH ₃ CHO	44.05	Acetaldehído	0.014
CH ₃ COCH ₃	58.08	Acetona	0.002
CH ₃ OH	32.04	Metanol	0.002
MEK	72.11	Metiletilcetona (butanona)	0.009
TOLUENE	92.14	C ₆ H ₅ (CH ₃) Agrupación de aromáticos	0.205
ISOP	68.12	C ₅ H ₈ Isopreno	0
C ₁₀ H ₁₆	136.23	Agrupación de monoterpenos (α -pineno)	0
Total			1

En el esquema CBM-Z, las especies: eteno (ETH), etanol (C₂H₅OH), etano (C₂H₆), formaldehído (CH₂O), acetaldehído (CH₃CHO), isopreno (ISOP) y metanol (CH₃OH), tienen una equivalencia directa con las especies del mecanismo MOZART. Las metilcetonas (MEK) y las acetonas (CH₃COCH₃) se reúnen en el grupo AONE. Los alquenos se distribuyen en OLT (45%), OLI (45%) y PAR (10%). A este último grupo pertenecen también los alcanos (C₅H₁₂: agrupación de C > 3 alcanos), el propano (C₃H₈) y el propeno (C₃H₆). Las especies aromáticas (C₆H₅(CH₃)), que originalmente estaban en un solo grupo en MOZART, se dividen ahora en toluenos (TOL, 50%) y xilenos (XYL, 50%).

Tabla 2-4. Factores de especiación para el esquema de fase gaseosa CBM-Z en WRF-Chem

Espece en CBM-Z	Masa molar (g/mol)	Descripción	Fracción del total de NMVOCs (relativa a la unidad)
ETH	28.05	Eteno	0.047
C ₂ H ₅ OH	46.07	Etanol	0.035
C ₂ H ₆	30.07	Etano	0.051
HCHO	30.03	Formaldehido	0.007
ALD2	44.05	Acetaldehído	0.014
CH ₃ OH	32.04	Metanol	0.003
ISOP	68.12	Isopreno	0
AONE	58.08	Acetonas y metiletilcetona	0.011
PAR	400.00	Carbonos de parafina	0.583
OLT	42.08 (basada en el propeno)	Alquenos terminales	0.022
OLI	56.11 (basada en el buteno)	Alquenos internos	0.022
TOL	92.14	Tolueno	0.102
XYL	106.16	Xileno	0.102
C ₁₀ H ₁₆	68.12 (basada en el isopreno)	Monoterpenos	0
Total			1

En el esquema RADM-2, las especies: alcanos (HC₅), eteno (OL2), etanol (C₂H₅OH), etano (ETH), formaldehído (HCHO), isopreno (ISO), acetaldehído y aldehídos superiores (ALD), tienen una equivalencia directa con las especies del mecanismo MOZART y se les asignan los factores correspondientes. Los alquenos (BIGENE en MOZART) se distribuyen al 50% en OLI y al 50% en OLT. El propeno (C₃H₆) también se asigna al grupo OLT. Las acetonas (CH₃COCH₃) y las metiletilcetonas (MEK) se agrupan dentro del grupo KET. Las especies aromáticas, como en CBM-Z, se dividen igualmente en TOL y XYL. Por último, el grupo HC₃ reúne al propano (C₃H₈) y al metanol (CH₃OH).

Tabla 2-5. Factores de especiación para el esquema de fase gaseosa RADM-2 en WRF-Chem

Especie en RADM-2	Masa molar (g/mol)	Descripción	Fracción del total de NMVOCs (relativa a la unidad)
HC ₅	72.00	Alcanos con tasa de OH constante (298.1 atm) entre 3.4×10^{-12} y 6.8×10^{-12}	0.504
OLT	42.08	Alquenos terminales	0.044
OLI	56.11	Alquenos internos	0.025
HC ₃	44.00	Alcanos con tasa de OH constante entre 2.7×10^{-13} y 3.4×10^{-12}	0.057
OL2	28.05	Eteno	0.047
C ₂ H ₅ OH	46.07	Etanol	0.035
ETH	30.07	Etano	0.051
HCHO	30.00	Formaldehído	0.007
ALD	44.05	Acetaldehído y aldehídos superiores	0.014
KET	72.08	Cetona	0.011
TOL	92.14	Tolueno	0.102
XYL	106.16	Xileno	0.102
ISO	68.12	Isopreno	0
Total			1

2.3.4.2 Especiación para aerosoles

Los aerosoles primarios se emiten en forma de partículas a partir de diversas fuentes naturales y antropogénicas. Los aerosoles secundarios, en cambio, son partículas producidas en la atmósfera a partir de reacciones químicas en fase gaseosa que generan especies condensables (Seinfeld & Pandis, 2006). Los inventarios de emisiones por lo general incluyen las emisiones totales para aerosoles primarios, tales como el material particulado de diámetro aerodinámico inferior o igual a $10 \mu\text{m}$ (PM_{10}), el material particulado de diámetro aerodinámico inferior o igual a $2.5 \mu\text{m}$ ($\text{PM}_{2.5}$), el sulfato en aerosol (SO_4^{2-} / sulf), el carbono negro (BC) y el carbono orgánico (OC / ORG). En algunos casos las especies SO_4 , OC y BC no están disponibles, pero pueden obtenerse como factores porcentuales de los valores totales del material particulado según su composición. En esta tesis, dicha distribución porcentual se realizó siguiendo la metodología de desarrollada por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA) para la Herramienta de Análisis de Validación de Datos de Especiación (SVDAT) (Peterson et al., 2002), donde del total de partículas se asigna 27% al SO_4 , 23% al OC y el 3% al BC.

Las especies de aerosoles deben ser redistribuidas por tamaño en tres grandes grupos para ser consideradas por los esquemas de aerosoles MOSAIC y MADE: modo de nucleación (I), modo de acumulación (J) y modo grueso (C). A partir del total de $\text{PM}_{2.5}$ (o de cada una de las especies individuales de aerosoles incluidas en el inventario), el 20% se asignará al modo I y el 80% al modo J. El modo C se toma únicamente del total de PM_{10} , previamente distribuido en SO_4 , OC y BC. Finalmente, en el caso

de GOCART, al ser un esquema de conjunto, no es necesario que las especies se distribuyan en estos modos.

Una explicación más detallada de la especiación de los aerosoles desarrollada para esta tesis puede encontrarse en el trabajo de Lopez Noreña et al. (2019 a) citado en el Anexo A.3.2.

Tabla 2-6. Factores de especiación para los esquemas de aerosoles GOCART, MOSAIC y MADE en WRF-Chem ^a

Especie en GOCART	Especie en MOSAIC y MADE	Descripción	Factor de especiación
PM_10	PM_10	Partículas de diámetro aerodinámico inferior o igual a 10µm	PM ₁₀
PM_25	PM25I PM25J	Partículas de diámetro aerodinámico inferior o igual a 2.5µm	0.2 PM _{2.5} 0.8 PM _{2.5}
BC	ECI ECJ ECC	Carbono Negro	0.2 BC (0.2*0.03 PM _{2.5}) 0.8 BC (0.8*0.03 PM _{2.5}) 0.03 PM ₁₀
OC	ORGI ORGJ ORGC	Carbono Orgánico	0.2 OC (0.2*0.23 PM _{2.5}) 0.8 OC (0.8*0.23 PM _{2.5}) 0.23 PM ₁₀
sulf	SO4I SO4J SO4C	Sulfato en aerosol	0.2 SO ₄ (0.2*0.27 PM _{2.5}) 0.8 SO ₄ (0.8*0.27 PM _{2.5}) 0.27 PM ₁₀

^a las dos primeras columnas de la tabla equivalen a los nombres de las especies en los archivos de entrada parra WRF-Chem.

2.4 Condiciones iniciales y de contorno químicas (IC/BC)

En un modelo químico regional, al igual que en los campos meteorológicos, las sustancias químicas y los aerosoles considerados requieren de IC/BC. Dichas condiciones permiten que se tenga en cuenta la concentración de fondo (carga atmosférica) en las simulaciones, de modo que el modelo inicie sus cálculos con condiciones similares a las de la atmósfera real y, además, contemple los procesos de transporte de escala global que suceden fuera del dominio de simulación.

Las IC/BC pueden ser idealizadas, proceder de un CCM o de una simulación previa de WRF-Chem y son ingresadas al modelo a través de los archivos `wrfinput_d<dominio>` (para las condiciones iniciales, IC) y `wrfbdy_d<dominio>` (para las condiciones de contorno, BC). De no ser especificada ninguna de estas opciones, el modelo asignara valores constantes o nulos a las especies químicas gaseosas y valores nulos para los aerosoles. La información química IC/BC proveniente de un sistema de modelado global puede incluirse en el modelo WRF-Chem a través de la herramienta `mozbc`, que permite interpolar los campos químicos del modelo global a la resolución del dominio definido con el WPS. Dado que los trazadores químicos utilizados por el modelo global pueden diferir de los utilizados por los esquemas

químicos y de aerosoles dentro de WRF-Chem, las IC/BC también requieren mapas de especiación que pueden variar en función del mecanismo químico de WRF-Chem y el modelo global utilizado para los datos de entrada.

En las primeras simulaciones de prueba para esta tesis, los valores de concentración de IC/BC de las especies químicas se obtuvieron del modelo de transporte químico global MOZART-4 que hasta ese momento era el modelo más utilizado y óptimamente implementado para ser acoplado con el modelo WRF-Chem. El modelo MOZART-4 transporta las cargas de aerosoles en masa, por lo cual se necesita una distribución de tamaño asumida cuando se mapea a esquemas de aerosol seccionales o modales. Al calcular los IC/BC, en particular para el mecanismo CBM-Z/MOSAIC, se observó que las concentraciones de PM_{2.5} simuladas con WRF-Chem presentaban valores muy elevados, sin embargo, luego se encontró que por defecto el PM_{2.5} no se tomaba directamente desde una variable en particular, sino que buscaba especies individuales aerosoles en los archivos de entrada de MOZART-4 y luego hacia la sumatoria de todas. Para entender de dónde procedían las IC/BC de PM_{2.5} dentro del modelo, fue necesario acudir a las subrutinas WRF-Chem. Se encontró que los valores iniciales de PM vienen dados por la siguiente ecuación de la rutina `module_mosaic_driver.f90`

$$PM_{2.5}(i, k, j) = PM_{2.5}(i, k, j) + SO_{4aer} + NO_{3aer} + Cl_{aer} + NH_{4aer} + OIN_{aer} + OC_{aer} + BC_{aer} + Na_{aer} \quad (2)$$

En donde el postfijo `_aer` indica que cada especie es leída del archivo de entrada considerando su concentración en masa.

Después de revisar individualmente las especies involucradas en la ecuación 2, se encontraron inconsistencias en los archivos de entrada de MOZART-4. Las concentraciones de otros aerosoles inorgánicos (OIN) y BC se mostraban particularmente altas en la zona de los Andes centrales y el sur de la Argentina (Figura 2-11), lo que resultó en concentraciones simuladas muy altas de PM_{2.5} en algunas áreas del dominio. Debido a que se trata de un modelo global de resolución gruesa, algunas de estas zonas con topografía compleja pueden no estar correctamente representadas. Para suavizar el efecto de las altas concentraciones de OIN y BC en las zonas mencionadas, se realizaron varias pruebas con interpolaciones y promedios de valores cercanos. Sin embargo, dado que los problemas con MOZART-4 eran persistentes, se realizaron simultáneamente pruebas utilizando el modelo global *The Community Atmosphere Model with Chemistry* (CAM-Chem, Lamarque et al., 2012) como entrada para los IC/BC de WRF-Chem.

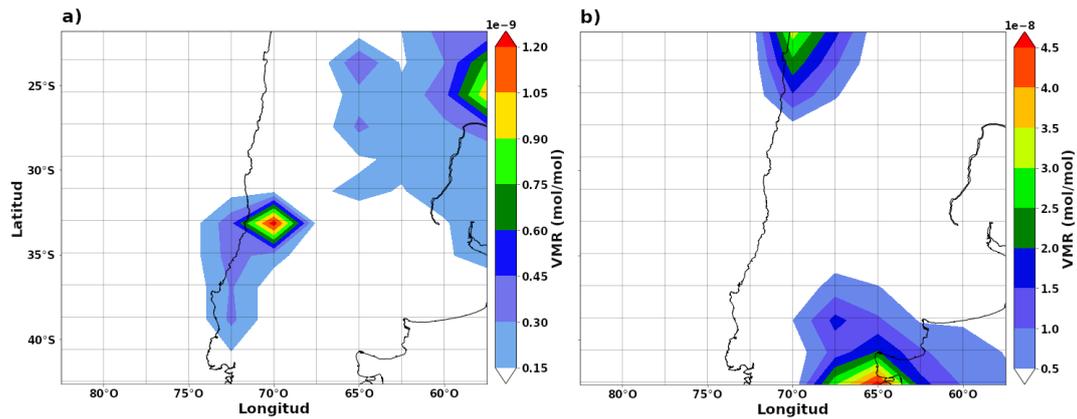


Figura 2-11. Condiciones iniciales generadas con MOZART-4 para un dominio centrado en los Andes Centrales, para a) BC y b) OIN. (Elaboración propia)

El acoplamiento de WRF-Chem con CAM-Chem implicó la adaptación de las herramientas de preprocesamiento utilizadas para MOZART-4, lo que requirió algunas modificaciones menores ya que la mayoría de los códigos eran compatibles. Se seleccionó CAM-Chem porque ha sido implementado previamente por el grupo en diferentes trabajos relacionados con la química de los compuestos halogenados (Fernandez et al., 2014) y, por tanto, sus reacciones y funcionamiento son bien conocidos. La comprensión de su funcionamiento y ejecución, además, deja abierta la posibilidad de futuros estudios combinando WRF-Chem y CAM-Chem, con la oportunidad de involucrar otros tipos de química más compleja como la química de halógenos.

Los resultados obtenidos en las pruebas de CAM-Chem no registraron los problemas señalados anteriormente con MOZART-4 para los aerosoles. Además, se pudo apreciar que la zona de Argentina cuenta con una mayor representación espacio-temporal tanto para gases como aerosoles. La Figura 2-12 muestra la comparación entre las IC/BC generadas para NO_2 con MOZART-4 (Panel izquierdo) y con CAM-Chem (Panel derecho) para el mismo dominio y las mismas fechas de simulación. Obsérvese que hay varias zonas, especialmente en la parte sur del dominio, en las que MOZART-4 mostró valores iguales a cero, mientras que CAM-Chem muestra la existencia de valores bajos (pero no nulos) en la zona continental sur y el mar argentino. Además, las concentraciones en la parte norte del dominio presentan también una mejor distribución.

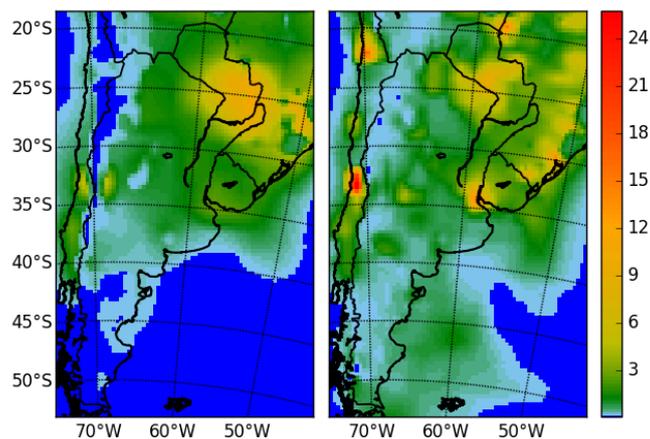


Figura 2-12. Condiciones iniciales (wrfinput_d01) para NO_2 ($\mu\text{g m}^{-3}$) generadas a partir de MOZART-4 (Panel izquierdo) y CAM-Chem (Panel derecho). (Elaboración propia)

En el momento en que se decidió utilizar CAM-Chem, el equipo de desarrollo de WRF-Chem recomendaba utilizar MOZART-4 como modelo global por defecto para las IC/BC químicas. Sin embargo, hacia el final de esta tesis, los mismos desarrolladores han recomendado el uso de CAM-Chem en su lugar, lo que corrobora la decisión tomada anteriormente en este trabajo. MOZART-4 sigue estando disponible para la comunidad, sin embargo, ya no se desarrolla ni se mantiene y sus resultados sólo son accesibles para fechas anteriores al 18 de marzo de 2022. Para facilitar el acceso de la comunidad de usuarios de WRF-Chem a los datos de CAM-Chem, el equipo de desarrollo ha puesto a disposición los resultados de una simulación de CAM-Chem (CESM2.0), con una resolución horizontal de $0.9^\circ \times 1.25^\circ$ y 56 niveles verticales, que están disponibles desde 2001 hasta el presente. También proporcionan una herramienta para extraer fácilmente subconjuntos de regiones y fechas específicas en un formato adecuado para el modelo WRF-Chem. Asimismo, los resultados de las previsiones químicas globales en tiempo casi real del modelo WACCM también están disponibles para su uso como IC/BC del WRF-Chem. Se puede encontrar información adicional en la página oficial de herramientas para la comunidad de WRF-Chem <https://www2.acom.ucar.edu/wrf-chem/wrf-chem-tools-community>.

2.5 WRF-Chem Kinetic PreProcessor (WRF-Chem-KPP)

Los mecanismos químicos de WRF-Chem incluyen un gran número de reacciones químicas y especies, por lo que la solución de los correspondientes sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias requiere integradores numéricos muy eficientes. WRF-Chem tiene en principio dos esquemas de fase gaseosa que han sido codificados directamente en el modelo: RADM-2 y CBM-Z. Los pequeños cambios en estos mecanismos químicos, su actualización con ecuaciones adicionales, o la incorporación de nuevos mecanismos químicos, suelen requerir importantes modificaciones y revisiones en el código fuente, lo que supone una considerable dedicación de tiempo y puede dar lugar a errores involuntarios al actualizar el modelo (Grell et al., 2010). Por esto, surge la necesidad de incorporar la herramienta de

generación automática de código *Kinetic PreProcessor* (KPP) (Damian et al., 2002; Sandu et al., 2003; Sandu & Sander, 2006). Este software lee una lista de ecuaciones químicas junto con las constantes de reacción definidas por el usuario a partir de un archivo `.def` en formato de texto plano (ASCII), y a partir de allí genera automáticamente el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias a resolver. Para ello utiliza otros archivos de entrada como `.spc` para la definición de las especies químicas, `.eqn` para las reacciones en formato KPP y `.kpp` para la descripción del modelo, el lenguaje computacional y la preconfiguración del método de integración (p. ej., el solucionador Rosenbrock). A partir de estos archivos se genera automáticamente el código de cálculo para la integración numérica dentro de WRF-Chem.

A lo largo de los años, mecanismos como MOZART y SAPRC99 se han incluido en WRF-Chem a través de esta herramienta y requieren que el sistema WRF-Chem-KPP esté totalmente acoplado para su funcionamiento. El acoplamiento de KPP con WRF-Chem es opcional, ya que no todos los mecanismos químicos necesitan las librerías KPP compiladas, pero si se requiere, debe compilarse desde cero junto con el modelo WRF-Chem lo cual necesita una serie de consideraciones adicionales (p. ej., nuevas librerías, compiladores y variables de entorno) especificadas en el manual de WRF-Chem (ver también la Sección 2.6.2).

Los casos de estudio presentados en esta tesis involucraron la compilación WRF-Chem-KPP, ya que MOZART-GOCART así lo requiere, aunque no se implementaron modificaciones al mecanismo definido por defecto, ya que el objetivo central de los casos de estudio no lo requería. Sin embargo, la base técnica para la implementación y/o modificación de un mecanismo de reacción definido por el usuario con KPP, se adquirió a través de una pasantía de investigación en el Instituto de Química Física Rocasolano del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (IQFR-CSIC) en España, que tiene una amplia experiencia en este campo. En esta colaboración se estudiaron los procedimientos necesarios para acoplar diferentes mecanismos químicos implementados en WRF-Chem con el esquema de halógenos de última generación del modelo global CAM-Chem a través de KPP. Además, se aprendieron diferentes enfoques para incluir las emisiones de halocarbonos marinos siguiendo el desarrollo de Badia et al. (2019). De esta interacción surgieron trabajos y colaboraciones que implican la compilación y uso de este mecanismo, tanto para Argentina (Lopez-Noreña et al., 2019b, citado en el Anexo A.3.3) como para otras regiones del planeta (Li et al., 2021). Una descripción más detallada de esta y de otras interacciones desarrolladas paralelamente a esta tesis se encuentra en el Anexo A.

A continuación, se presenta una breve descripción de los pasos a seguir para incluir un nuevo mecanismo químico en WRF-Chem con KPP.

1. Agregar el nuevo mecanismo en el archivo `$WRF/Registry/registry.chem` (tomando como ejemplo un mecanismo similar ya existente) y añadiendo al final del nombre el sufijo `_kpp` (ej.

- mecanismo_nuevo_kpp). Allí mismo, se listan las especies necesarias y se selecciona el número para la opción de `namelist.input` que le corresponde (`chem_opt = ##`).
- Si el mecanismo requiere nuevas variables, estas deben ser agregadas en el archivo `$WRF/Registry/Registry.EM_COMMON`, si las variables solamente están relacionadas con la química estas se agregan en el archivo `$WRF/Registry/registry.chem`. En este paso también se especifica si la especie es fotolizable y/o requiere emisiones.
 - Crear subdirectorios con el nombre del mecanismo definido en el primer paso, sin incluir el sufijo `_kpp` (ej. `/mecanismo_nuevo/`) en las siguientes carpetas:
 - `$WRF/chem/KPP/mechanisms/`
 - `$WRF/chem/KPP/inc/`
 - Crear los archivos de KPP correspondientes con las nuevas reacciones, tasas de reacción y especies:
 - `mecanismo_nuevo.def` (para reacciones)
 - `mecanismo_nuevo.eqn`
 - `mecanismo_nuevo.kpp`
 - `mecanismo_nuevo.spc` (para especies)
 - `mecanismo_nuevo_wrfkkpp.equiv`
 - `atoms_red`
 - Modificar dentro de la carpeta `$WRF/chem/` los archivos terminados en `.F` agregándoles la opción del nuevo mecanismo químico. Por ejemplo:
 - `chem_driver.F`
 - `aerosol_driver.F`
 - `chemics_init.F`
 - `cloudchem_driver.F`
 - `dry_dep_driver.F`
 - `emissions_driver.F`
 - `module_bioemi_megan2.F`
 - `photolysis_driver.F`
 - `convert_emiss.F`
 - El último paso es compilar de nuevo el modelo WRF-Chem-KPP y verificar que al terminar la compilación el mecanismo haya sido incluido correctamente.

2.6 Implementación del modelo

Esta subsección incluye algunos de los principales aspectos técnicos para tener en cuenta al momento de realizar la configuración de WRF-Chem y WRF-Chem-KPP para los distintos tipos de estudio que se realizaron durante esta tesis.

2.6.1 Pautas para la selección del dominio de simulación

Las siguientes son algunas consideraciones para tener en cuenta en el momento de seleccionar la configuración del dominio de simulación.

- La resolución de los dominios de simulación debe seleccionarse en función del área de estudio en cuestión y de la escala de movimiento horizontal en la que se encuentran los procesos atmosféricos de interés para la simulación. El tamaño de la celda para los procesos de microescala (que se producen principalmente dentro de la PBL), suele ser inferior a 2 km, para los procesos de mesoescala es entre 2 y 2000 km y para los procesos de escala sinóptica es superior a 2000 km. En WRF, el uso de dominios anidados permite considerar procesos que suceden en diferentes escalas, es decir, se selecciona un dominio exterior más grueso (con un tamaño de celda mayor) y dominios interiores con mayor resolución dentro de éste (dominios anidados). Las BC químicas y meteorológicas de los dominios más finos se interpolan a partir de los datos proporcionados por el dominio más grueso inmediatamente anterior. Esto facilita el acoplamiento entre los modelos globales y los dominios de mayor resolución dentro del modelo, y reduce los posibles errores asociados a las diferencias de resolución horizontal entre los datos de entrada y la simulación.
- Las fronteras del dominio no deben atravesar terrenos con topografía compleja, ya que esto introduce un ruido numérico en la frontera que puede propagarse hacia el interior del dominio. Asimismo, es aconsejable que los bordes del dominio no se crucen en la dirección de pendientes con altos gradientes o picos muy pronunciados.
- La región de interés debe estar lo más alejada posible de los límites laterales del dominio, para evitar que el modelo introduzca ruidos no deseados cuando se requiera un cálculo más preciso (por ejemplo, para comparar con las observaciones).
- En cada uno de los dominios se debe seleccionar el conjunto de parametrizaciones físicas y dinámicas que mejor se adapte a la resolución de la celda. Es preciso prestar especial atención a la selección de la parametrización de los cúmulos y la microfísica de las nubes (ver Sección 2.2).
- La estabilidad numérica de la simulación depende en gran medida del tamaño del paso de tiempo (Δt , expresado en segundos) y de la resolución espacial (Δx , expresado en kilómetros).

Para evitar inestabilidades numéricas que lleven a una solución irreal de los cálculos del modelo, se sigue un criterio de estabilidad que relaciona los cambios en el tiempo, el espacio y la velocidad de propagación de una magnitud determinada. Este criterio (c) es un número adimensional conocido como número de Courant-Friedrich-Levy, ($CFL = c(\Delta t/\Delta x)$) que debe permanecer menor o cercano a 1 en cada paso de integración de la simulación para evitar la difusión numérica. Para seleccionar adecuadamente el tamaño del paso de tiempo para la simulación y evitar infringir el criterio CFL, se recomienda que el paso de tiempo seleccionado (en segundos) sea menor o igual a 6 veces el tamaño de la resolución de la celda (en kilómetros), $\Delta t \leq 6 * \Delta x$.

- La selección correcta de la proyección cartográfica es importante para minimizar la distorsión dentro del área geográfica cubierta por la cuadrícula del modelo. El modelo WRF dispone de tres proyecciones: Lambert-Conformal (adecuada para latitudes medias), Mercator (adecuada para latitudes bajas o ecuatoriales) y Polar estereográfica (adecuada para dominios de alta latitud). Así, por ejemplo, para las simulaciones de esta tesis la proyección adoptada ha sido Lambert-Conformal por ser la más apropiada para las latitudes consideradas.

2.6.2 Configuración y compilación de WRF-Chem-KPP

En el marco de esta tesis, se utilizó por primera vez la versión *online* totalmente acoplada de WRF-Chem-KPP. Los trabajos anteriores del grupo en los que se utilizaba WRF-Chem (sin KPP) se llevaban a cabo utilizando únicamente computadoras/PC de escritorio o mediante asociaciones con otras instituciones para unificar los recursos informáticos. Durante la primera etapa de la realización de esta tesis, fue necesario compilar y poner a disposición para su uso WRF-Chem v4.0 con KPP. Esta versión se ha instalado en las máquinas propias del grupo, para pruebas de bajo coste computacional o de corta duración, y también en el Centro de Computación de Alto Rendimiento (TOKO) de la FCEN-UNCUYO (ver Sección 2.6.4). A continuación, se exponen algunos aspectos claves del proceso de configuración de WRF-Chem-KPP, cuya metodología es similar a la compilación del modelo meteorológico WRF.

1. Antes de configurar y compilar WRF-Chem-KPP, comprobar que todas las librerías requeridas estén correctamente instaladas en el sistema UNIX que se va a utilizar. La guía del usuario de WRF y WRF-Chem (Peckham et al., 2010) proporciona instrucciones para la instalación de los paquetes o librerías adicionales que requiere el modelo. En particular, si se quiere compilar con KPP, la máquina que se utilice debe tener al menos 6 GB de memoria RAM disponibles. Además, es necesario comprobar si las librerías **Flex** (analizador léxico rápido) y **yacc** (*Yet Another Compiler-Compiler*) están instaladas. **Flex** se incluye normalmente con **GNU bison**, puede descargarse gratuitamente en <http://www.ncl.ucar.edu/Download/files/flex.tar.gz> y la versión que se

utilizó fue [flex2.5.3](#). Se debe prestar especial atención con la librería [yacc](#), ya que, en algunos ordenadores, es un alias de [GNU bison](#). La versión a utilizar es [yacc](#) de Berkley ([byacc](#)), y puede descargar desde <http://invisible-island.net/byacc/byacc-20140101.tgz> .

- Después de instalar todas las librerías, es preciso configurar las variables de entorno correspondientes para que el compilador del modelo pueda acceder a ellas. Esto también se indica en la guía del modelo (Peckham et al., 2010), a continuación, se destacan las variables específicas para KPP con los entornos [c-shell](#) y [k-shell](#).

Tabla 2-7. Variables de entorno para la configuración de WRF-Chem-KPP

c-shell	k-shell	Descripción
setenv WRF_CHEM 1	export WRF_CHEM=1	Indica que se usa WRF-Chem
setenv WRF_KPP 1	export WRF_KPP=1	Indica que se usa con KPP
setenv FLEX_LIB_DIR	export FLEX_LIB_DIR=/usr/lib	Indica la ruta a la librería flex (libfl.a / libfl.sh)
setenv YACC '/usr/bin/yacc -d'	export YACC='/usr/bin/yacc -d'	Indica la ruta a la librería yacc

- Descargar y descomprimir el código fuente de WRF-Chem-KPP desde la web oficial. En el archivo [\\$WRF/chem/KPP/compile_wkc](#) es importante verificar que las rutas a los archivos `.csh` están correctamente configuradas. En el archivo [\\$WRF/chem/KPP/kpp/kpp/kpp-2.1/src/scan.1](#) se deben sustituir las líneas indicadas en la Tabla 2-8 para poder utilizar las versiones más actualizadas de la librería [Flex](#). Estos cambios, dependen de la versión de las librerías utilizadas, por lo que no se incluyen oficialmente en el manual de instalación, pero pueden ser útiles para solucionar o evitar futuros problemas en la compilación del modelo. La Tabla 2-8 enumera las líneas que deben ser reemplazadas o comprobadas junto con el nombre del archivo correspondiente.

Tabla 2-8. Líneas y archivos por modificar dentro de la carpeta de KPP

Archivo	Línea original	Línea nueva (cambios resaltados en rojo)
compile_wkc	linker.csh	<code>./linker.csh</code>
compile_wkc	write_decom.csh	<code>./write_decom.csh</code>
scan.1	yy_buffers[yy_buf_level] = yy_current_buffer;	yy_buffers[yy_buf_level] = YY_CURRENT_BUFFER;
scan.1	oldb = yy_current_buffer;	oldb = YY_CURRENT_BUFFER;

- Ejecutar en la carpeta [\\$WRF/chem/KPP/kpp/kpp-2.1/src/](#) el comando `flex scan.1`, que generará el archivo `lex.yy.c` el cual debe ser editado copiando y pegando las siguientes líneas al comienzo del texto. Nótese que estas definiciones ya figuran dentro del archivo, pero las versiones más recientes de la librería [Flex](#) no las identificarán si no están al principio del archivo.

```

#define INITIAL 0
#define CMD_STATE 1
#define INC_STATE 2
#define MOD_STATE 3
#define INT_STATE 4
#define PRM_STATE 5
#define DSP_STATE 6
#define SSP_STATE 7
#define INI_STATE 8
#define EQN_STATE 9
#define EQNTAG_STATE 10
#define RATE_STATE 11
#define LMP_STATE 12
#define CR_IGNORE 13
#define SC_IGNORE 14
#define ATM_STATE 15
#define LKT_STATE 16
#define INL_STATE 17
#define MNI_STATE 18
#define TPT_STATE 19
#define USE_STATE 20
#define COMMENT 21
#define COMMENT2 22
#define EQN_ID 23

```

- Una vez hecho esto, se puede continuar con los pasos registrados en la guía del modelo. El siguiente paso es configurar el código dentro de la carpeta `$WRF/` con el comando `./configure`. Aparecerá una lista de opciones que permiten seleccionar el conjunto de configuraciones más apropiado para el compilador y la máquina en la que se van a ejecutar las simulaciones. Este paso es especialmente importante a la hora de seleccionar las opciones de memoria compartida (utilizada para realizar simulaciones en múltiples procesadores). Las opciones para WRF incluyen: `serial` (cuando se utiliza un solo procesador), `smpar` (*Shared Memory Parallel, OpenMP*), `dmpar` (*Distributed Memory Parallel, MPI*) o una combinación de ambos (`dmpar+smpar`), sin embargo, con WRF-Chem solo se puede utilizar `serial` o `dmpar`. La opción 34, que incluye `dmpar` junto con el compilador `GNU (gfortran/gcc)`, fue seleccionada para la configuración en las máquinas del grupo, así como en TOKO. Detalles más avanzados respecto a esta configuración se explican en la Sección 2.6.3.

6. Después de ejecutar el comando `./configure`, verificar que las opciones de química y KPP estén incluidas en el archivo `$WRF/configure.wrf`, que contiene la información de configuración de la compilación del modelo. Controlar la línea que contiene las definiciones de compilación del entorno (ENVCOMPDEFS).

- Si el modelo se configuró con WRF-Chem y sin KPP, debe estar escrita de la siguiente manera:

```
ENVCOMPDEFS = -DWRF_CHEM
WRF_CHEM = 1
```

- Si el modelo se configuró con WRF-Chem-KPP, quedará plasmado de la siguiente manera:

```
ENVCOMPDEFS = -DWRF_CHEM -DBUILD_CHEM=1 -DWRF_KPP
WRF_CHEM = 1
```

7. Finalmente compilar el código de WRF-Chem-KPP utilizando el comando estándar para casos reales `./compile em_real >& compile.log`, controlar que los ejecutables han sido construidos correctamente y que el archivo `compile.log` no tiene errores.

Las diferentes pruebas realizadas en esta tesis incluyeron la compilación del modelo en numerosas ocasiones, por ejemplo, para probar diferentes versiones, para evaluar la eficiencia de realizar la opción de distribución paralela, para incluir o modificar parcialmente un mecanismo químico, entre otras cosas. Dado que el proceso de compilación y las opciones de configuración en este caso son similares tanto en las máquinas del grupo como en TOKO, se desarrolló un paquete de instalación que permite una compilación relativamente automática de WRF, WPS, WRF-Chem y WRF-Chem-KPP, junto con sus respectivas librerías, facilitando así el proceso de compilación y reduciendo el número de posibles errores humanos relacionados con este proceso. Este paquete de compilación automática está configurado para ejecutar WRFV4 con Chem y KPP, pero también se ha comprobado su funcionamiento con otras versiones del modelo y en las distribuciones de Ubuntu 14.04, 16.04 y 18.04. El paquete se compone de tres archivos: `compile_wrf_and_deps_v1.sh`, que contiene el código y ejecutables para los diferentes pasos de compilación; `variables.sh`, es el archivo de entrada para el código, en el cual el usuario detalla la versión del modelo a compilar, y las versiones de las librerías específicas a utilizar; `flex_modifications_kpp.txt`, que incluye información adicional para llevar a cabo el procedimiento particular para Flex y yacc explicado anteriormente en esta sección. El paquete completo de compilación queda disponible en el repositorio de esta tesis.

Para utilizar el paquete de instalación, primero hay que editar el archivo ejecutable `variables.sh`, y a continuación ejecutar el siguiente comando para descargar todas las librerías, código fuente y dependencias del modelo `./compile_wrf_and_deps_v1.sh -download`. Finalmente, la compilación de las librerías y del modelo WRF-Chem-KPP puede hacerse en un solo paso de la siguiente manera: `./compile_wrf_and_deps_v1.sh -build_deps -build_wrf`. En la Tabla 2-9 se describen los principales usos de éstos y otros comandos que están disponibles.

Tabla 2-9. Comandos de entrada para el archivo `compile_wrf_and_deps_v1.sh`

Comando	Descripción
<code>./compile_wrf_and_deps_v1.sh -download</code>	Crea la carpeta <code>downloads/</code> y allí descarga las librerías y el código fuente del modelo.
<code>./compile_wrf_and_deps_v1.sh -build_deps</code>	Compila las librerías descargadas y ejecuta varias operaciones de chequeo para asegurarse de que se han instalado correctamente.
<code>./compile_wrf_and_deps_v1.sh -build_wrf</code>	Compila el modelo WRF, WRF-Chem o WRF-Chem-KPP, en función de la configuración seleccionada a través del archivo <code>variables.sh</code>
<code>./compile_wrf_and_deps_v1.sh -build_wps</code>	Compila el WPS.

2.6.3 Paralelización de procesos en WRF

Cuanto más compleja es una simulación (resoluciones más finas, dominios más grandes o escalas de tiempo más largas), mayor será la demanda de recursos y tiempos de cálculo. El modelo WRF incluye estrategias de computación de alto rendimiento para responder eficazmente a dichas necesidades, permitiendo la paralelización de los cálculos. El mismo programa computa diferentes secciones del dominio en paralelo, distribuyendo el trabajo entre uno o más nodos de computación con múltiples núcleos de procesamiento (cada núcleo es una unidad de cómputo independiente dentro de un nodo o procesador).

El modelo WRF-Chem admite la paralelización con herramientas de memoria distribuida a través de MPI (interfaz de paso de mensajes) y de memoria compartida a través de OpenMP (interfaz de programación de aplicaciones para la programación multiproceso de memoria compartida), que pueden utilizarse por separado o conjuntamente. Esto permite descomponer en el plano horizontal el dominio de simulación en subdominios y asignarlos a núcleos individuales de manera paralela, lo que busca aprovechar la máxima capacidad de cada nodo o procesador y reducir el tiempo total de la tarea computacional. Para dominios pequeños, OpenMP o MPI pueden usarse individual e indistintamente dentro de un solo nodo, pero cuando se necesita más de un nodo (clúster de computadoras), es obligatorio usar MPI para la comunicación entre los mismos.

La descomposición del dominio se hace de tal manera que cada trozo de este se asigna a un solo núcleo de procesamiento. La cantidad final de celdas que tendrá cada subdivisión dependerá de los valores

ajustables por el usuario en tiempo de ejecución (variables `nproc_x` y `nproc_y` del `namelist.input`) calculándose con la siguiente expresión.

$$n_{x,y} = \frac{N_{x,y} - 1}{nproc_{x,y}} \quad (3)$$

Donde n es igual a las celdas por lado del subdominio y N es igual al número de celdas por lado del dominio completo. Como restricción, n debe ser mayor a 10 celdas evitando así que el cálculo diverja. Como sugerencia (y opción por defecto) de los desarrolladores del modelo y para lograr un cálculo más eficiente, `nproc_x` y `nproc_y` deben ser dos números cercanos entre ellos cuyo producto sea igual al número total de procesadores seleccionado. Por ejemplo, si se tiene un total de 64 procesadores, las siguientes combinaciones estarán disponibles: 64x1, 32x2, 16x4 y 8x8 siendo la selección por defecto 8x8 procesadores.

2.6.4 Clúster TOKO

La ejecución de procesos de alta demanda computacional (p. ej., varias simulaciones en paralelo, con dominios más grandes o que implican una mayor cantidad de tiempo y recursos computacionales), se realizó sobre el Centro de Computación de Alto Rendimiento (Clúster TOKO) de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FCEN), Universidad Nacional de Cuyo y el Instituto para las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones (ITIC), que forma parte del SNCAD-MinCyT (<http://toko.uncu.edu.ar/>). En la actualidad, el centro está equipado con un nodo maestro AMD FX 6100 de 6 cores, con 4 GB de RAM y 5 TB de disco rígido; cuatro nodos supermicro, con 16 núcleos cada uno, 64 núcleos en total por nodo; conexión gigabit ethernet con el maestro del nodo y memoria RAM de: 64 GB (1), 256 GB (1) y 128 GB (2); tres nodos con 1 AMD FX-8350 8 núcleos a 4 GHz, 16 GB de RAM cada uno y dos GPUs NVIDIA GeForce 620.

La elevada capacidad de procesamiento de TOKO permite tiempos de cálculo mucho más eficientes que los de las máquinas de escritorio disponibles en el grupo. El envío de trabajos dentro del clúster TOKO se realiza a través del sistema de gestión de colas SLURM. Este programa asigna a los usuarios el acceso a los nodos de cálculo durante un periodo de tiempo determinado para ejecutar trabajos en paralelo, proporciona un marco para iniciar, ejecutar y supervisar el trabajo en el conjunto de nodos asignados, y gestiona la cola de trabajos pendientes entre todos los usuarios. Una vez seleccionada la configuración de la simulación, creados todos los archivos de entrada necesarios y determinados los recursos computacionales requeridos, se ejecuta el comando `sbatch` de SLURM:

```
sbatch submit.job
```

Donde `submit.job` es el archivo de entrada contiene toda la información necesaria para la distribución de tareas, y lanza la simulación para entrar en la cola de trabajos, a la espera de que se libere la cantidad solicitada de recursos computacionales para comenzar a ejecutar el programa de integración numérica del modelo: `wrf.exe`. En el repositorio de la tesis se incluye un ejemplo de este archivo.

2.6.5 Análisis de rendimiento de WRF-Chem-KPP en el clúster TOKO

La eficiencia con la que el modelo WRF-Chem-KPP se ejecuta en el clúster TOKO, se evaluó a través de una serie de simulaciones de prueba. La ejecución de las simulaciones se efectuó sobre un mismo nodo de manera exclusiva, y durante un tiempo de simulación de 12 horas (43200 segundos), alternando diferentes combinaciones de número de procesadores, tamaño de dominio, resolución horizontal y número de niveles verticales. Se midió el tiempo de ejecución de cada simulación, obteniendo así un valor medio del tiempo de simulación en función del número de procesadores, siendo 64 el número máximo de procesadores posibles a ser utilizados. Teniendo en cuenta las recomendaciones descritas en la Sección 2.6.3, el tamaño mínimo del dominio de simulación para utilizar la totalidad de procesadores debe ser de 81x81 celdas para no exceder la unidad mínima de procesamiento al realizar la descomposición del dominio (10x10 celdas). La Tabla 2-10 recopila la información sobre las sensibilidades realizadas y los resultados obtenidos para cada caso.

Para evaluar el rendimiento se realizaron pruebas de un único dominio con resolución de 10 km y 20 km, las cuales se probaron sobre 64, 32, 16 y 8 procesadores, en busca de la cantidad óptima a utilizar con el mínimo tamaño de dominio posible (81x81 celdas). Estas simulaciones se probaron con 55 y 26 niveles verticales. Se pudo identificar que el tiempo total de ejecución de la simulación disminuye a medida que aumenta el número de procesadores, siendo las simulaciones con 32 procesadores más rápidas que las de 8 y 16 procesadores. Sin embargo, cuando se utiliza el número máximo de procesadores (64) y a medida que la descomposición del dominio empieza a acercarse a la unidad mínima, el tiempo de ejecución empieza a aumentar, por lo que el número de procesadores a utilizar debe ser inferior al número máximo de procesadores del que se puede disponer en función del número de celdas que componen el dominio.

Para analizar la sensibilidad ante cambios en la resolución vertical se hicieron pruebas disminuyendo significativamente la cantidad de niveles verticales utilizados. Como el análisis de los resultados será centrado en las capas del modelo más cercanas a la superficie, se disminuyó la resolución principalmente en las capas superiores de la atmósfera y manteniendo la resolución en los niveles inferiores. Al reducir a la mitad los niveles verticales, la velocidad de la simulación se duplicó.

Tabla 2-10. Resultados de las pruebas de sensibilidad para el análisis de rendimiento en TOKO

Resolución horizontal	Dominios	Celdas	Niveles verticales	NT	Trl	VS	VS/ NT
Dominio único pequeño con alta resolución							
10 km	1	81*81	55	64	742	58.22	0.90
				32	436	99.08	3.09
				16	525	82.28	5.14
				8	820	52.68	6.58
10 km	1	81*81	26	64	-	-	-
				32	208	207.69	6.49
				16	247	174.89	10.93
20 km	1	81*81	55	64	496	87.09	1.36
				32	375	115.2	3.6
				16	507	85.20	5.32
			26	8	789	54.75	6.84
				64	335	128.95	2.01
				32	185	233.51	7.29
20 km	1	100*100	55	64	611	70.70	1.10
				32	503	85.88	2.68
Dominios anidados							
36 km, 12 km, 4 km, 1.3 km	4	91*91	55	64	20100	2.14	0.03
				32	21726	1.98	0.06
20 km, 4 km, 1.3 km	3	91*91	55	64	9152	4.72	0.07
				32	7232	5.97	0.18
Dominio único grande con diferentes resoluciones							
20 km (Arg)	1	111*200	55	64	1039	41.57	0.64
				32	1002	43.11	1.34
10 km (Arg)	1	222*400	55	64	3977	10.86	0.16
				32	4363	9.90	0.30
36 km (Arg)	1	62*111	55	32	368	117.39	3.66

* Trl = Tiempo reloj de simulación (segundos); Velocidad de simulación (VS) = 43200/ Trl; NT = número total de procesadores

Una vez realizadas las sensibilidades anteriores, se procedió a analizar las alternativas de combinación de tamaño de dominio vs. procesadores aplicadas a los casos de estudio de esta tesis. En el caso de estudio sub-regional (ver Capítulo 5) el objetivo es alcanzar un dominio de 1.3 km de resolución. Siguiendo las recomendaciones de la guía de usuarios de WRF, se propuso inicialmente una configuración de dominios anidados con una relación telescópica de 3:1, es decir, 36 km, 12 km, 4 km, 1.3 km. Sin embargo, se consideró también la posibilidad de hacer 20 km, 4 km, 1.3 km y, dado que los resultados dentro del dominio de mayor resolución para ambas simulaciones no mostraron diferencias significativas, se decidió realizar pruebas de sensibilidad sobre esta última combinación de dominios. Las simulaciones se ejecutaron en 64 y 32 procesadores, con 55 niveles verticales y un tamaño de dominio de 91x91 celdas, el cual permite evaluar el rendimiento de las simulaciones con las combinaciones de dominios anidados descritas anteriormente, sin desviarse mucho del tamaño de dominio mínimo para 64 procesadores. Aumentar la resolución del dominio más externo (de 36 km a 20 km) y eliminar el dominio intermedio de 12 km supuso que la velocidad de simulación se duplicara (para 64 procesadores) y se triplicara (para 32 procesadores).

Para el caso de estudio regional (ver Capítulo 6) se realizaron pruebas sobre un único dominio que contiene toda Argentina, conservando el área cubierta por el dominio y variando entre resoluciones horizontales de 36km, 20km y 10km, lo que implica también una variación en el número de celdas contenidas en el dominio. Todas las simulaciones se realizaron con 55 niveles verticales y en 32 y 64 procesadores, excepto la simulación con 36km de resolución cuyo número de celdas horizontales no permitía descomponer el dominio con 64 procesadores. Estas simulaciones muestran que los tiempos de ejecución con 32 y 64 procesadores son muy similares para cada resolución. Sin embargo, cuando se duplica la resolución, por lo que se cuadruplica el número de píxeles del dominio se observa que la velocidad de ejecución es 4 veces inferior.

A continuación, se presentan algunas conclusiones relevantes en función de las pruebas realizadas:

- Al aumentar la relación de resolución entre dominios de 3:1 a 5:1 no se advierte una pérdida de desempeño en el modelado, pero se aumenta significativamente su eficiencia computacional.
- En caso de necesitar hacer simulaciones en paralelo conviene ejecutarlas en paralelo en un mismo nodo (y no hacerlo de manera secuencial) ocupando el número máximo de procesadores por nodo.
- Es importante definir de manera correcta los niveles verticales para no agregar costos computacionales innecesarios.
- La velocidad de simulación es inversamente proporcional a la cantidad de píxeles totales del dominio.

Teniendo en cuenta las conclusiones anteriores, para el caso de estudio sub-regional (ver Capítulo 5) se utilizó la combinación de dominios anidados de 20 km, 4 km y 1.3 km con el número total de procesadores por nodo (64 procesadores) para un período de simulación de 22 días. Este caso incluye 3 simulaciones finales y 6 simulaciones preliminares de validación, las cuales requirieron 8 minutos de tiempo de ejecución por hora de simulación, es decir, un tiempo total de 3 días cada una. Además de las simulaciones finales se destaca que se debieron realizar incontables simulaciones de prueba hasta obtener la configuración optimizada. En el caso de estudio regional/estacional (ver Capítulo 6) se decidió trabajar con una resolución de 10 km y 26 niveles verticales, paralelizando las simulaciones en 4 ejecuciones simultáneas de 16 procesadores cada una, para aprovechar mejor la capacidad de TOKO y reducir el tiempo total requerido para las sensibilidades realizadas. Este caso supuso un total de 32 simulaciones de un mes de duración cada una, incluyendo 4 simulaciones para estabilizar las IC/BC químicas que posteriormente se utilizaron como *spin up* para las 28 sensibilidades finales. El tiempo de ejecución en este caso es de 3-5 minutos por hora de simulación con un tiempo total por simulación de aproximadamente 2.5 días.

3 Emisiones

El objetivo de las bases de datos o inventarios de emisión es proporcionar información cuantitativa sobre los flujos de contaminantes primarios de origen antropogénico y biogénico que entran en la atmósfera, tanto en forma de gases como de aerosoles (Figura 3-1). Estas emisiones deterioran la calidad del aire, contribuyendo al cambio climático y generando modificaciones en ciclos naturales como el ciclo hidrológico o el ciclo del carbono (Brasseur & Solomon, 2005). El conocimiento de las emisiones es el punto de partida de cualquier problema de contaminación, ya sea a nivel local o global. Por ello, disponer de esta información es indispensable para comprender los problemas medioambientales e investigar posibles alternativas para su mitigación (Puliafito et al., 2011).

Los inventarios de emisiones desempeñan un papel fundamental en la modelación de la calidad del aire y la química atmosférica, ya que proporcionan información esencial y, junto con los campos meteorológicos y las IC/BC, pueden ser una fuente importante de incertidumbre en los resultados de los modelos (Guevara et al., 2014). Dado que el desempeño de un modelo de calidad del aire está fuertemente ligado a la precisión del conjunto de datos de entrada que lo alimenta, es de vital importancia incluir una estimación precisa de las emisiones biogénicas y antropogénicas, contando con la información más actualizada y con la mejor resolución posible, con el fin de lograr una representación adecuada del estado de la atmósfera.

La incorporación de la información de emisiones a un sistema de modelado atmosférico suele implicar una laboriosa tarea de programación para combinar, ajustar y adaptar los inventarios originales a los requisitos del modelo (Guevara et al., 2019). En el caso del modelo WRF-Chem el usuario debe construir los archivos de entrada de emisiones para cada dominio de simulación y realizar la especiación de acuerdo con el mecanismo de fase gaseosa y aerosoles deseado. El modelo recibe información sobre las emisiones antropogénicas, biogénicas y por quema de biomasa en archivos de entrada independientes. En algunos casos, los archivos de entrada contienen información que se lee durante la inicialización de `real.exe` a partir de la cual el modelo calcula las emisiones (p. ej., emisiones biogénicas y por quema de biomasa); mientras que en otros casos las emisiones se leen de los archivos de entrada durante la ejecución de la simulación (p. ej., las emisiones antropogénicas son leídas cada hora).

Hasta la fecha, no hay una herramienta generalizada que permita construir los archivos de entrada de las emisiones de forma unificada para cualquier dominio y cualquier mecanismo químico que se seleccione. Por lo tanto, la comunidad de WRF-Chem ha puesto a disposición una serie de herramientas de preprocesamiento (p. ej., `anthro emis`, `fire emis`, `megan bio emiss`) que permiten reagrupar la información de una base de datos determinada y recortarla o reordenarla según el dominio y la resolución deseados para la simulación. Aunque estas herramientas simplifican en gran medida el

proceso de ajuste al dominio de simulación, varios de los inventarios de emisiones siguen requiriendo un preprocesamiento para ajustarse al formato específico y poder ser utilizados correctamente utilizando las herramientas mencionadas.

3.1 Emisiones antropogénicas

Las emisiones antropogénicas son causadas por actividades asociadas a la acción humana. Entre las principales fuentes de emisión antropogénicas se incluyen la incineración de combustibles fósiles para producir energía (plantas de calefacción y centrales térmicas), los grandes procesos industriales, el transporte (terrestre, naval y aéreo) y los sistemas agrícolas (ver Figura 3-1). Estas fuentes pueden ser agrupadas de acuerdo con tres categorías:

- Fuentes puntuales o estacionarias: son fuentes individuales que se caracterizan por estar en un punto fijo. Entre ellas se encuentran las plantas de energía, refinerías, fábricas e industrias.
- Fuentes de área: son fuentes individuales que son demasiado pequeñas o dispersas para ser clasificadas como una fuente puntual pero que en general son numerosas y en conjunto pueden representar un porcentaje significativo de las emisiones totales. Entre ellas se pueden encontrar actividades urbanas como: los comercios, sistemas residenciales de calefacción, lavanderías, asfaltado de vías y otras actividades no urbanas como la agricultura y la ganadería.
- Fuentes móviles o de línea: son fuentes de emisión que son susceptibles a desplazarse y abarcan las emisiones de todas las formas de transporte (vehículos automotores, trenes, aviones y barcos), donde la emisión total se distribuye sobre los trayectos o líneas que recorren estas fuentes (por ejemplo: autopistas, vías férreas, pistas de aeropuerto, trayectorias aéreas y marítimas).

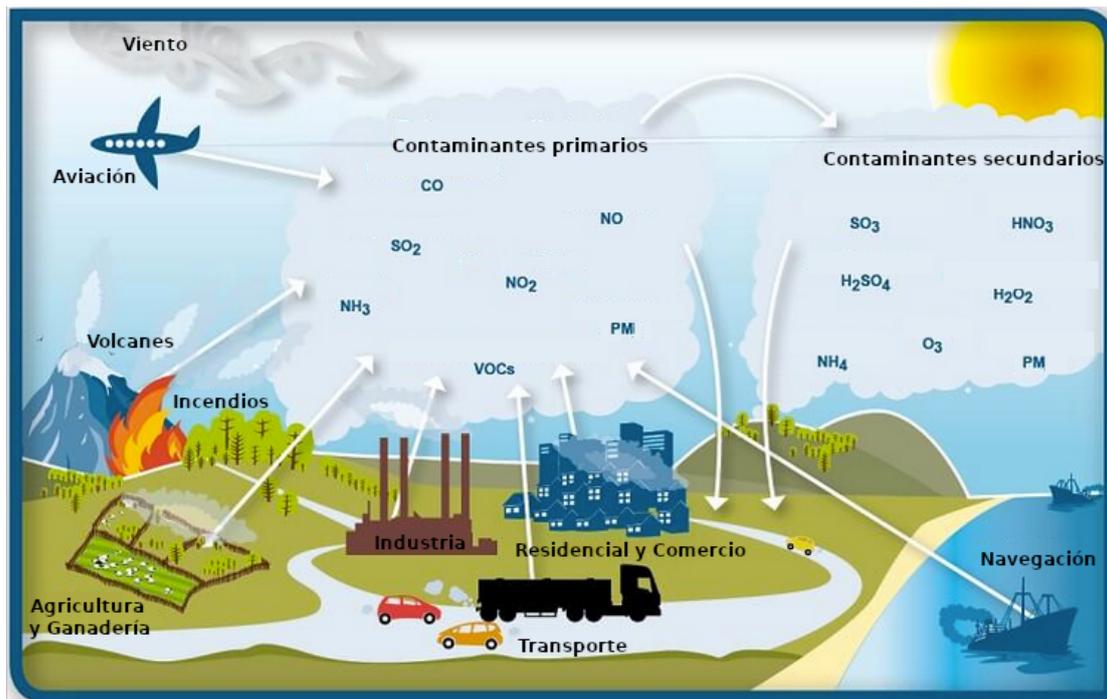


Figura 3-1. Fuentes de contaminación antropogénica. Adaptado de William Green/Mr. G. Science (traducido) CC BY-SA 4.0

3.1.1 Inventarios de emisiones antropogénicas

Las emisiones antropogénicas utilizadas en los estudios de modelado de la calidad del aire a escala global, regional, urbano y local se derivan generalmente de inventarios de emisiones atmosféricas con diferentes resoluciones espaciales y temporales. Estos inventarios suelen elaborarse combinando las estadísticas disponibles de población, consumo de energía, producción de combustibles fósiles, producción industrial y agricultura, entre otras, con los factores de emisión más adecuados para cada tipo de actividad. Las diferencias entre ellos radican en la estimación de dichos factores de emisión además de las metodologías de desagregación/distribución espacial, así como en los criterios de clasificación de las fuentes de emisión (Kuenen et al., 2014).

Entre los inventarios globales de emisiones antropogénicas más utilizados se encuentran: EDGAR (Crippa et al., 2018, 2020; Janssens-Maenhout et al., 2019), el cual aplica una metodología de cálculo homogénea para todos los países del mundo con el fin de proporcionar una estimación histórica de las emisiones de gases de efecto invernadero y contaminantes, siguiendo la metodología propuesta por el Panel Intergubernamental del Cambio Climático (IPCC), tiene una resolución espacial de $0.1^{\circ} \times 0.1^{\circ}$ y resolución temporal mensual; el inventario de *Hemispheric Transport of Air Pollution Task Force* (HTAPv2, Janssens-Maenhout et al., 2015) reúne la información disponible de diferentes inventarios de emisiones regionales y nacionales (para Estados Unidos, Canadá, Europa y China), complementada con

el inventario EDGAR, conformando un conjunto de datos global completo, para los años 2008 y 2010, unificado en siete categorías de emisiones, con una resolución espacial de $0.1^{\circ} \times 0.1^{\circ}$ y resolución temporal mensual; el inventario del proyecto *Evaluating the Climate and Air Quality Impacts of Short-Lived Pollutants* (ECLIPSE, Klimont et al., 2017), generado con el modelo *Greenhouse gas - Air pollution Interactions and Synergies* (GAINS, Amann et al., 2011), presenta emisiones anuales totales y perfiles de emisión mensuales para algunos sectores, y se distingue por incluir explícitamente las características tecnológicas según la fuente y la región, contabilizando fuentes como las lámparas de queroseno, la quema de gas, los generadores Diesel y la quema de residuos, con una resolución espacial de $0.5^{\circ} \times 0.5^{\circ}$; el inventario *Community Emissions Data System* (CEDS, Hoesly et al., 2018), toma las emisiones de fuentes como EDGAR, GAINS y otros inventarios de escala regional/nacional, y se basa en conjuntos de datos de consumo de energía para calcular las tendencias de las emisiones en las últimas décadas (de 1950 a 2019). El CEDS, se encuentra categorizado por país, sector y combustible, con una resolución espacial de $0.5^{\circ} \times 0.5^{\circ}$ y tiene distribución temporal mensual; CAMS (Granier et al., 2019) aplica las tendencias de CEDS sobre las emisiones de EDGAR para obtener una estimación de las emisiones en periodos de tiempos más actualizados, con una resolución temporal mensual y resolución espacial de $0.1^{\circ} \times 0.1^{\circ}$.

Algunos de los proyectos mencionados anteriormente proponen diferentes metodologías para integrar los inventarios regionales en las bases de datos globales de emisiones y han incluido hasta ahora información específica para países en Europa, Asia, África y América del Norte. Sin embargo, todavía hay regiones del planeta que tienden a estar pobremente representadas en las bases de datos globales debido a la escasez de inventarios nacionales de alta resolución y de campañas de medición, como es el caso de la gran mayoría de los países sudamericanos (Alonso et al., 2010). Por lo general, para estos países, los inventarios globales se basan en la información de los reportes técnicos nacionales (TCNA, 2019) preparados para cumplir con los requisitos de los organismos internacionales como la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático (UNFCCC), y utilizan bases de datos internacionales como la información de la población mundial (proporcionada por el Centro para la Red Internacional de Información de Ciencias de la Tierra (CIESIN) de la Universidad de Columbia), como variable *proxy* para la desagregación espacial de las emisiones. Sin embargo, estos inventarios suelen tener una resolución espacial gruesa, reducida a provincias o distritos, y proporcionan poco detalle sobre las actividades de emisión (Puliafito et al., 2011).

Para permitir una mejor representación de las características socioeconómicas regionales, es necesario desarrollar inventarios con alta resolución espacio-temporal, con fuentes desagregadas y mayor detalle acerca de la variabilidad de sectores y especies. La construcción de un inventario regional de este tipo requiere la recopilación de una gran cantidad de información, un trabajo minucioso a la hora de compilarla de forma transparente y coherente, así como una actualización continua. Existen varias

iniciativas con este enfoque para Perú (Romero et al., 2020), Chile (Álamos et al., 2022; Osses et al., 2022), Brasil (Dos Santos Lucon & Moutinho Dos Santos, 2005; Policarpo et al., 2018; Vivanco & Andrade, 2006) y Colombia (Pachón et al., 2018), pero la información de estas bases de datos no cubre todo el país con el mismo detalle (se elabora para una ciudad/región concreta), su acceso no está abierto a la comunidad, carece de un formato estandarizado o considera un número reducido de especies/fuentes contaminantes. En los últimos años han surgido algunos proyectos, como *Prediction of Air Pollution in Latin America and the Caribbean* (PAPILA, Castesana et al., 2022), que buscan consolidar un inventario regional de emisiones para Sudamérica a través de la integración de la información disponible de los inventarios nacionales en una única base de datos con una metodología consistente. Sin embargo, al momento de realizar esta tesis dicho proyecto se encontraba en una etapa temprana de desarrollo, por lo cual se centró el estudio exclusivamente en Argentina. La Tabla 3-1 reúne las principales características de los conjuntos de datos globales y regionales con información disponible sobre emisiones antropogénicas para Argentina.

Tabla 3-1 Resumen de los inventarios globales y regionales que contienen datos de emisiones antropogénicas para Argentina

Nombre	Resolución espacial	Escala temporal	Sectores	Especies	Cobertura espacial	Cobertura temporal	Referencia
GEAA-AEIV3.0M	0.025° x0.025°	Mensual	15	CO ₂ , CH ₄ , N ₂ O, CO, NO _x , NMVOCs, NH ₃ , SO ₂ , PM ₁₀ , PM _{2.5} , TSP, BC	Regional (Argentina)	1995-2020	(Puliafito et al., 2021)
TCNA	Totales nacionales	Anual	5	CO ₂ , CH ₄ , N ₂ O, CO, NO _x , NMVOCs, SO ₂ , HFC, PFCs, SF ₆	Regional (Argentina)	1990-2016	TCNA, 2019
PAPILA	0.1°x0.1°	Anual	12	CO, NO _x , NMVOCs, NH ₃ , SO ₂	Regional (Sudamérica)	2014-2015	(Castesana et al., 2022)
EDGAR-HTAPv2	0.1°x0.1°	Mensual/ Anual	7	CO, NO _x , NMVOCs, NH ₃ , SO ₂ , PM ₁₀ , PM _{2.5} , OC	Global	2008 y 2010	(Janssens-Maenhout et al., 2015)
EDGARv4.3	0.1°x0.1°	Mensual/ Anual	26	CO ₂ , CH ₄ , CO, NO _x , NMVOCs, NH ₃ , SO ₂ , PM ₁₀ , PM _{2.5}	Global	1970-2012	(Crippa et al., 2018)
EDGARv5	0.1°x0.1°	Mensual/ Anual	38	CO ₂ , CH ₄ , CO, NO _x , NMVOCs, NH ₃ , SO ₂ , PM ₁₀ , PM _{2.5} , BC, OC	Global	1970-2015	(Crippa et al., 2020)
CAMS	0.1°x0.1°	Mensual/ Anual	20	CO ₂ , CH ₄ , N ₂ O, CO, NO _x , NMVOCs, NH ₃ , SO ₂ , BC, OC	Global	2000-2022	(Granier et al., 2019)
CEDS	0.5°x0.5°	Mensual	9	CO ₂ , CH ₄ , CO, NO _x , NMVOCs, NH ₃ , SO ₂ , BC, OC	Global	1950-2019	(Hoesly et al., 2018; McDuffie et al., 2020)
ECLIPSEv6	0.5°x0.5°	Anual	11	CO, CH ₄ , NO _x , NMVOCs, NH ₃ , SO ₂ , PM ₁₀ , PM _{2.5} , BC, OC	Global	1990-2050	(Klimont et al., 2017)

3.1.2 Inventarios de emisiones antropogénicas utilizados en esta tesis

El Grupo GEAA-UTN, ha trabajado activamente en los últimos años en el desarrollo del Inventario de emisiones antropogénicas de alta resolución para Argentina (GEAA-AEI), diseñado para optimizar el rendimiento de la modelización de la calidad del aire, identificando fuentes, especies y sectores con gran detalle, de manera precisa y actualizada para todo el país (Pulíafito et al., 2015, 2017, 2020). La última versión de este inventario (GEAA-AEIv3.0M, Pulíafito et al., 2021) contiene información sobre las emisiones atmosféricas con variabilidad mensual desde 1995 hasta 2020 y con una resolución espacial de $0.025^{\circ} \times 0.025^{\circ}$. Incluye 7 especies en fase gaseosa (CO_2 , CH_4 y N_2O , NO , NO_2 , NMVOCs, NH_3 , SO_2) y 4 especies de aerosoles (PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$, Partículas Suspendidas Totales (PST) y BC) distribuidas en 15 sectores organizados según los códigos IPCC 2006, que incluyen las siguientes actividades: producción de energía, emisiones fugitivas de la producción de petróleo y gas, consumo y producción de combustibles industriales, transporte, agricultura, producción ganadera, industria manufacturera, residencial, comercial y quema de biomasa y residuos agrícolas.

El inventario GEAA-AEI ha sido construido a partir de información específica de diferentes organismos e informes oficiales de la nación: las bases de datos públicas del Ministerio de Energía y Minas (MINEM) que detallan información sobre producción, procesamiento, ventas y consumo de combustibles; los informes de la Compañía Administradora del Mercado Mayorista Eléctrico de Argentina (CAMMESA) y el Ente Nacional Regulador de la Electricidad (ENRE) que reportan la generación de electricidad y consumo de combustible en las centrales eléctricas. En ellos, se dispone del consumo mensual de electricidad y gas natural para cada provincia y para cada subsector industrial, y con esta información se calcula la producción industrial de cada empresa. También se dispone de información precisa sobre la ubicación geográfica de las fuentes puntuales (como centrales eléctricas, fuentes industriales o estaciones de servicio) y, por tanto, la emisión puede asociarse a un punto concreto de la cuadrícula de referencia ($0.025^{\circ} \times 0.025^{\circ}$). Los datos del gas natural también pueden utilizarse para estimar las emisiones residenciales, por ser el principal combustible utilizado en dicho sector.

Una vez obtenidos los datos, dependiendo de la resolución espacial de la información original, las fuentes de área (como el consumo residencial y la producción agrícola) contenidas en una misma celda se suman o se desagregan espacialmente al tamaño de la celda de referencia. La desagregación se realiza a partir de un *proxy* poblacional que se basa en información de los censos de hogares, un mapa de fracciones censales que indica el número de hogares, la composición de la población (a una resolución muy fina para las ciudades y más amplia para las zonas rurales) y datos estadísticos sobre las necesidades básicas insatisfechas (NBI) para incluir las diferencias de consumo de los hogares (Pulíafito et al., 2017). Esta información es proporcionada por el Instituto Nacional de Estadísticas y Censos (INDEC, 2016).

Los datos de transporte público son brindados por la Comisión Nacional de Regulación del Transporte Público, la Navegación y los Ferrocarriles (CNRT), y la Administración Nacional de Aviación Civil (ANAC), mientras que el transporte privado se estima a partir de las ventas de combustible en las estaciones de servicio. Esta información se pondera en segmentos, basándose en las jerarquías y las longitudes de los tramos de carretera, derivados del producto satelital DMS-OLS/*Earth at Night*, que detecta las fuentes de emisión visibles durante la noche. A continuación, estos segmentos se integran en la cuadrícula de referencia, de modo que cada celda contenga una serie de pequeños segmentos de calle que en conjunto forman las fuentes de línea con una representación detallada. Por último, la información sobre eventos diarios de incendio y porcentajes de área quemada correspondientes a diferentes usos del suelo para la localización de las emisiones por quema de biomasa e incendios se toma de las estadísticas nacionales de incendios del Ministerio de Medio Ambiente, la Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE) y los productos Terra y Aqua del *sensor MODerate resolution Imaging Spectroradiometer* (MODIS, Giglio et al., 2009, 2013). Una descripción detallada del inventario puede encontrarse en (Puliafito et al., 2015, 2017, 2020, 2021), el conjunto de datos completo se encuentra disponible en <https://doi.org/10.17632/d6xrhpmzdp.2> (Puliafito et al., 2021).

En esta tesis se implementa el inventario regional GEAA-AEI para realizar simulaciones de la calidad del aire a escala sub-regional y regional. Dado que GEAA-AEI no considera las emisiones fuera del territorio argentino, se utilizó la base de datos EDGAR para las áreas del dominio de simulación que están fuera de la frontera argentina. En este contexto, este trabajo presenta de manera pionera la implementación integrada de un inventario regional y uno global dentro del modelo WRF-Chem para simulaciones de alta resolución en Argentina, incluyendo un caso de estudio urbano y un caso de estudio regional. En el caso de estudio sub-regional presentado en detalle en el Capítulo 5 (López-Noreña et al., 2022), se utilizó la base de datos EDGAR-HTAPv2 como inventario global fuera del territorio nacional. Teniendo en cuenta que estas simulaciones sólo abordan las emisiones totales y no una discriminación sectorial, los archivos proporcionados por la mencionada base de datos ofrecen una ventaja metodológica respecto a EDGARv4.3 al estar ya organizados en 7 categorías de actividades de emisión, por lo que, en una primera fase, requieren menos preprocesamiento para ser utilizados con la herramienta *anthro emis* (ver Sección 3.1.3.2). Es preciso aclarar que, para los países de Sudamérica, EDGAR-HTAPv2 no incluye ninguna actualización de inventarios desarrollados localmente, por lo que la distribución de las emisiones para estos países se basa en el inventario EDGARv4.3.

En el Capítulo 6 se presenta un análisis más detallado de la contribución espacio-temporal de las diferentes fuentes de emisión en Argentina a escala regional utilizando el inventario GEAA-AEI en combinación con un inventario global. El uso de EDGARv5 como inventario global fue más apropiado en este caso. Esta versión utiliza el mismo enfoque metodológico que EDGARv4.3, en el cual las emisiones se calculan principalmente a partir de información de bases de datos internacionales (p. ej.,

International Energy Agency (IEA), Food and Agriculture Organization of the United Nations (FAO), USGS, United Nations Statistics (UNSTATS) y UNFCCC, utilizando el conjunto de datos *Gridded Population of the World (GPWv3 de CIESIN)* como *proxy* poblacional para la desagregación espacial de las emisiones, y contando con un mayor detalle en la distribución temporal (Crippa et al., 2020; Janssens-Maenhout et al., 2019). En EDGARv4.3 la distribución mensual de las emisiones se basa en factores estacionales regionales obtenidos de la literatura científica, la estacionalidad de los países se define dependiendo de si pertenecen a las latitudes medias norte, sur o al ecuador (definido dentro del rango de 30°S y 30°N de latitud). Esto implica una variabilidad anual para el hemisferio norte, sin diferenciar por países; ésta se desplaza seis meses para representar la variabilidad en el hemisferio sur, y no se ha incluido un factor estacional para los países ecuatoriales (Janssens-Maenhout et al., 2019). En cambio, EDGARv5 calcula la variabilidad anual dividiendo el planeta en 23 regiones en función de la información sobre la zona climática, la temperatura media, las zonas ecológicas y otros parámetros socioeconómicos. Luego extrapola estos perfiles temporales para asignar la variabilidad a cada país (Crippa et al., 2020).

La Figura 3-2 muestra la distribución espacial de las emisiones totales anuales de Argentina obtenidas de GEAA-AEI y EDGARv5 para NO_x y PM₁₀. Se seleccionaron los datos de 2015 por ser el año con distribución mensual más actualizada disponible en EDGARv5 (Crippa et al., 2020). Se observa que los mayores valores de emisión se producen en torno a las áreas urbanas del país, principalmente en las grandes ciudades ubicadas en la región central y pampeana, y sobre la red de carreteras.

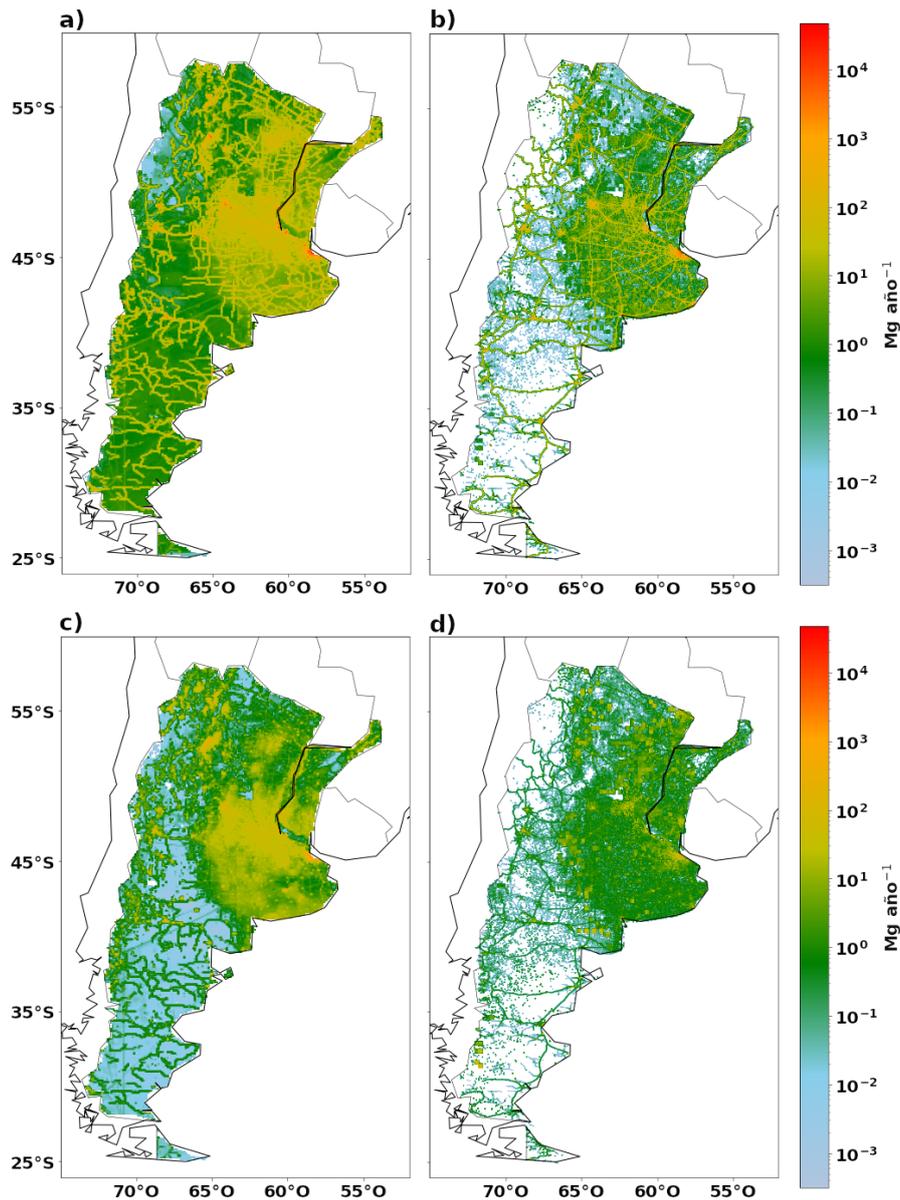


Figura 3-2. Distribución espacial de las emisiones antropogénicas anuales para Argentina (año 2015), obtenidas del inventario EDGAR para las especies a) NO_x y c) PM₁₀; y del inventario GEAA-AEI para las especies b) NO_x y d) PM₁₀. (Elaboración propia)

Las emisiones mostradas por EDGAR tienen una distribución basada en unidades administrativas nacionales y subnacionales como datos *proxy* de la población, lo que implica que al calcular las emisiones y desagregarlas espacialmente, las emisiones superficiales pueden ser mayores que la superficie real ocupada por la población (Pulíafito et al., 2021). Por otro lado, el inventario GEAA-AEI, al estar construido a partir de una base de datos *proxy* de mayor resolución (a partir de fracciones censales), es más susceptible a captar las variaciones espaciales de las emisiones con más detalle. Así mismo, EDGAR presenta en general un nivel de emisiones de fondo más elevado que GEAA-AEI, lo que le lleva a sobreestimar las emisiones rurales (Pulíafito et al., 2021). Estas diferencias son especialmente evidentes en las zonas rurales del país situadas en el noreste de Argentina y en la Patagonia, que son

zonas prácticamente despobladas y, en consecuencia, GEAA-AEI tiene valores muy bajos o nulos mientras que EDGAR tiene valores mucho más altos.

La representación de las emisiones procedentes del transporte por carretera también muestra importantes diferencias, como puede verse al comparar el mapa de las emisiones de NO_x (Figura 3-2), que proceden principalmente de este sector. El inventario GEAA-AEI considera la jerarquía de las rutas, de modo que las carreteras principales reciben un mayor porcentaje de emisiones, mientras que a las rutas de menor tráfico se les asignan valores más bajos, reflejando así el gradiente entre el transporte urbano y el rural (incluidos los vehículos pesados) y representando de manera más adecuada el volumen de tráfico. Por el contrario, en EDGAR las emisiones se distribuyen más uniformemente entre las rutas primarias y secundarias, lo que hace que a las rutas primarias se les asignen en promedio valores de emisión más bajos.

La Figura 3-3 muestra la variabilidad mensual de GEAA-AEI (media mensual para los años 2012-2020) y EDGAR (valores mensuales de 2015), junto con la serie temporal completa de ambos inventarios para NO_x y PM₁₀ (totales anuales). En la serie temporal anual de NO_x se observa una tendencia creciente con valores similares para GEAA-AEI y EDGAR, principalmente en los años más recientes. La serie estacional de GEAA-AEI tiene un valor máximo que coincide con los momentos de mayor demanda energética asociados a los meses de invierno, mientras que la estimación de EDGAR posee dos máximos anuales en otoño y primavera. Las emisiones de NO_x tienen una importante contribución relacionada con la demanda de energía, por lo que las discrepancias entre los patrones estacionales pueden estar relacionadas con las diferencias en la información sobre el consumo de energía utilizada por cada inventario, ya que como se explicó anteriormente, EDGAR toma la información de los Balances Energéticos Mundiales mientras que GEAA-AEI obtiene información actualizada reportada por las instituciones nacionales. Las diferencias por incorporar la información regional de alta resolución también se evidencian en la serie temporal anual de PM₁₀, donde se muestra una tendencia creciente para EDGAR, mientras que para GEAA-AEI las emisiones disminuyen desde el 2003, debido a que este inventario considera el cambio gradual que se ha dado en el país al cambiar el uso de combustibles para calefacción y cocina de leña y carbón al gas natural. En cuanto a la estacionalidad de PM₁₀, EDGAR mantiene dos valores máximos, mientras que la tendencia de GEAA-AEI se muestra relativamente constante. Este perfil con variabilidad menos pronunciada está esencialmente determinado por el sector de emisiones por quema de biomasa incluido en GEAA-AEI (sector no reportado por EDGAR), que en Argentina es una fuente importante de aerosoles, principalmente de PM₁₀. La variación estacional de las emisiones totales de PM₁₀ sin considerar este sector muestra una tendencia similar a la estacionalidad de NO_x. Una comparación más detallada entre GEAA-AEI, EDGAR y otros inventarios puede encontrarse en Puliafito et al. (2021).

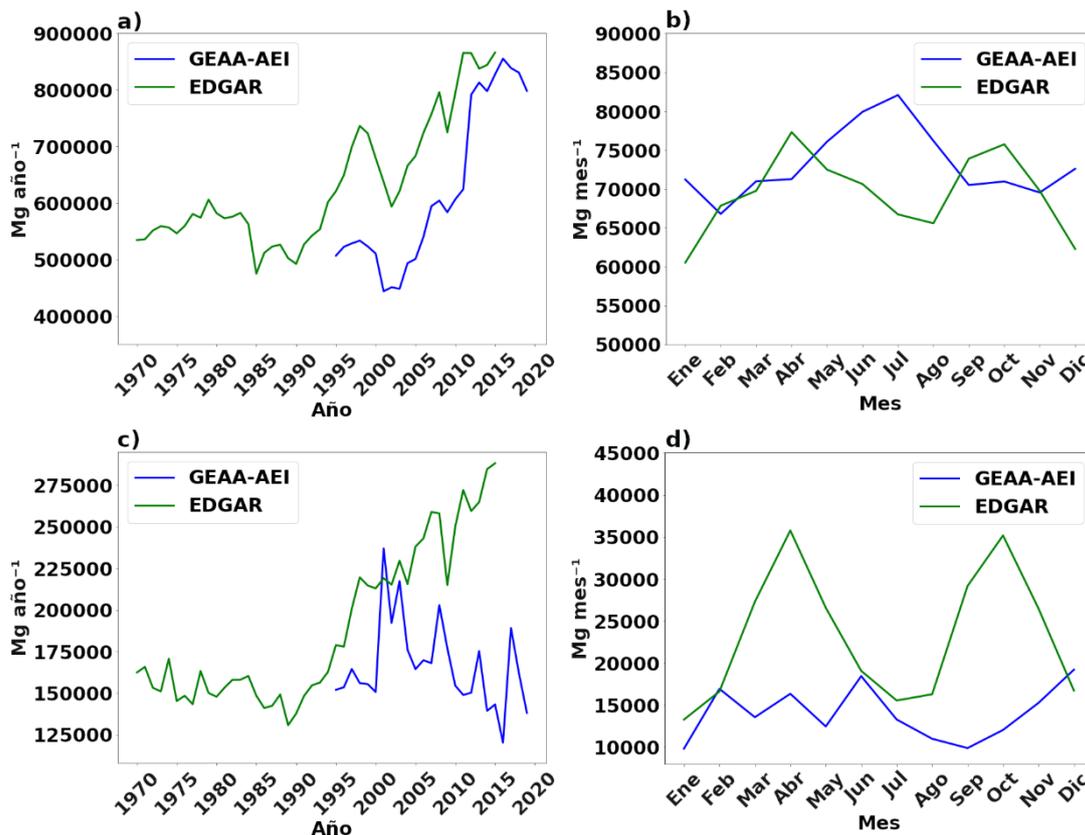


Figura 3-3. Emisiones totales de NOx procedentes de GEAA-AEI y EDGAR: a) serie anual y b) estacionalidad; Emisiones totales de PM₁₀ procedentes de GEAA-AEI y EDGAR: c) serie anual y d) estacionalidad. (Elaboración propia)

3.1.3 Procesamiento de las emisiones antropogénicas

Los datos de las emisiones antropogénicas son leídos por el modelo a través de los archivos `wrfchemi_*`, estos son archivos en formato NetCDF (formulario de datos comunes en red, un formato de archivo destinado a almacenar datos científicos multidimensionales) que contienen información sobre las cantidades emitidas para cada una de las especies de gases y aerosoles, dispuestos con la misma cuadrícula y dimensiones espaciales que los dominios de simulación del modelo WRF-Chem. Los nombres de las especies emitidas contenidas en el archivo `wrfchemi_*` deben coincidir con los requisitos del mecanismo químico y el esquema de aerosoles seleccionados. Estos archivos, pueden ser leídos en dos formatos temporales diferentes, indicados por la variable `io_style_emissions` del archivo `namelist.input` leído por los ejecutables `real.exe` y `wrf.exe`.

- El formato serial (`io_style_emissions=2`): contiene un archivo de emisiones para cada paso de tiempo de la simulación (por ejemplo, cada hora), así como para cada dominio, y se nombran de acuerdo con el formato `wrfchemi_d<dominio>_<fecha>_<hora>`.

- El formato cíclico (`io_style_emissions=1`): contiene las emisiones típicas, representativas de las 24 horas del día divididas en dos archivos de 12 horas cada uno, que se utilizan cíclicamente durante todos los días de la simulación. Se generan dos archivos para cada dominio de simulación, denominados `wrfchemi_00z_d<dominio>` y `wrfchemi_12z_d<dominio>`.

3.1.3.1 Anthro_emis

El preprocesador `anthro_emis` es una herramienta basada en `FORTRAN` desarrollada en el centro NCAR para crear archivos de emisiones antropogénicas listos para ser usados por WRF-Chem (tanto en formato serial como cíclico) a partir de inventarios globales cuyas emisiones están originalmente distribuidas en una cuadrícula equiespaciada en latitudes/longitudes. Esta herramienta calcula las emisiones diarias totales asociadas a cada par de coordenadas de latitud/longitud del inventario, computando la suma de los diferentes sectores (categorías de emisión) disponibles para cada especie emitida. A continuación, utiliza los archivos IC del WRF (`wrfinput_d<dominio>`) como base para recortar/redimensionar la matriz de emisiones resultante hacia la misma proyección previamente definida para cada dominio de simulación en distancias cartesianas (equiespaciada en kilómetros), con el fin de calcular las emisiones diarias totales por unidad de área para cada una de las celdas del dominio. Por último, las emisiones totales diarias se distribuyen para cada hora del día según un perfil temporal constante. Además de las modificaciones espacio-temporales, `anthro_emis` permite la especiación química de compuestos (tales como NMVOCs y PM) que suelen venir agregados en un solo grupo en los inventarios de emisión y que requieren una distribución específica para ser considerados dentro del mecanismo químico durante la simulación (ver Sección 2.3.4). La Figura 3-4 muestra el diagrama de flujo de la herramienta `anthro_emis`, especificando los archivos de entrada/salida y los diferentes procesos internos del programa.

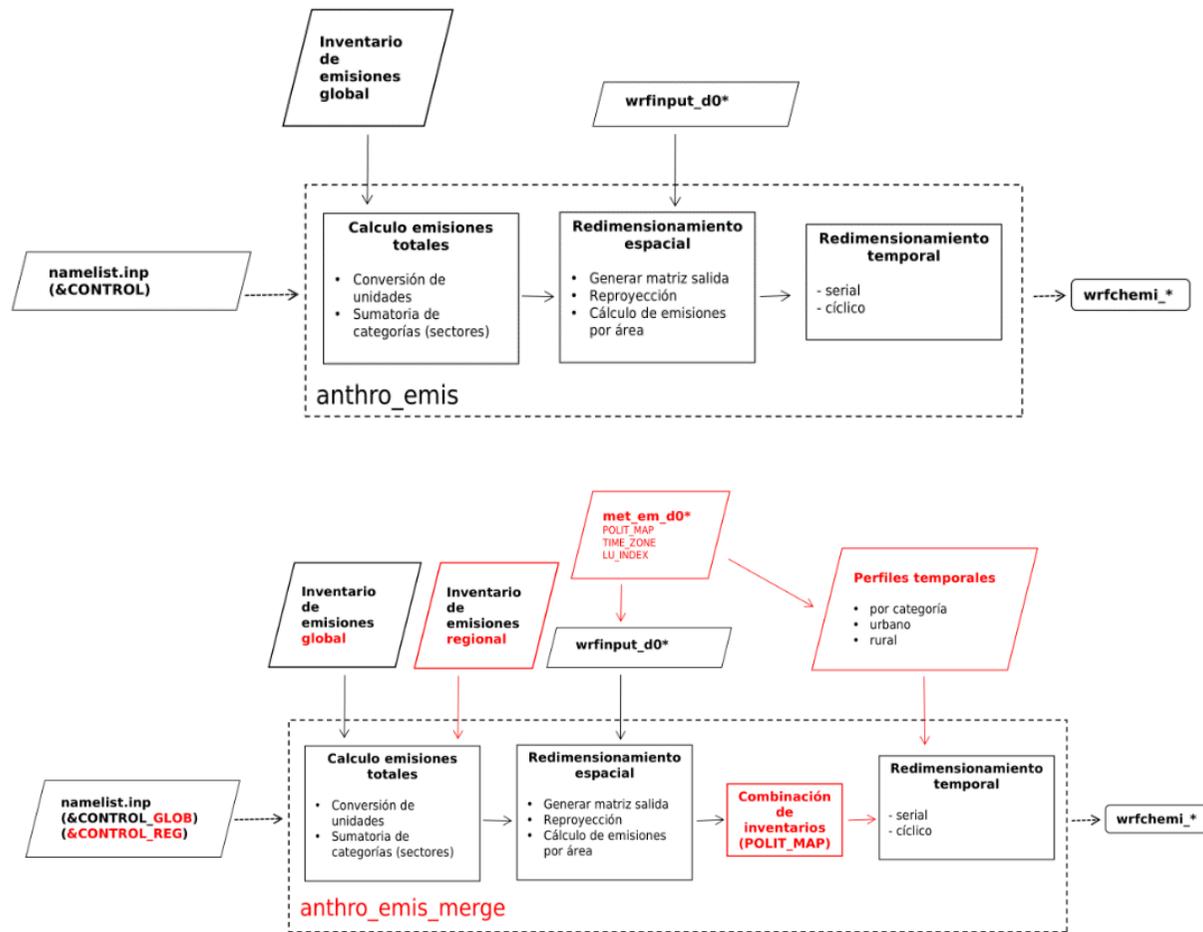


Figura 3-4. Diagrama de flujo de la herramienta `anthro_emis` original (en color negro) y modificaciones incluidas en la versión `anthro_emis_merge` (en color rojo). (Elaboración propia)

Las instrucciones necesarias para la ejecución del `anthro_emis` se obtienen del archivo de texto `namelist.inp`. Este archivo contiene una sección general `&control` que define diferentes parámetros entre los que se encuentran: la ruta de acceso a los archivos de entrada (`anthro_dir` para el inventario y `wrf_dir` para los `wrfinput_d<dominio>`), el formato cíclico o en serie de los archivos de salida (`serial_output`), la lista de sectores o categorías de emisión a considerar (`sub_categories`) y la lista de especies antropogénicas a incluir (`src_names`) que deben ir acompañadas de su peso molecular (g mol^{-1}). La variable `src_names` tiene una doble función: por una parte, se utiliza en la lectura de los archivos de emisión del inventario, y por otra, en combinación con la variable `emis_map`, se utiliza para mapear las especies químicas del inventario con las especies correspondientes al mecanismo químico seleccionado. El mapeo entre las emisiones antropogénicas de las especies del WRF-Chem y las emisiones de los inventarios se denota en el `emis_map` como sigue:

```
<especie en WRF> -> spc_mult * <especie en src_names>
```

Donde `<especie en WRF>` denota el nombre que tendrá la especie en los archivos de salida `wrfchemi_*` (y dentro de WRF-Chem) con la notación `E_<especie en WRF>`. En el caso de que la especie pertenezca al grupo de los aerosoles, debe indicarse con (a) en el `emis_map` siguiendo la forma `<especie en WRF(a)>`. La variable `<especie en src_names>` denota el nombre original de la especie dentro del inventario de emisiones y debe coincidir con la lista de nombres proporcionada en `src_names`. Finalmente, `spc_mult` es un número real que contiene el factor de especiación correspondiente. Los factores de especiación utilizados para los casos de estudio de la presente tesis se describen en el Capítulo 2. Para más información sobre la configuración del `namelist.inp`, la compilación del código fuente y los requisitos de librerías/software de la herramienta, consultar el archivo `README.anthro_emis` que se proporciona junto con el código fuente de la herramienta `anthro_emis` en el sitio web oficial del NCAR <https://www2.acom.ucar.edu/wrf-chem/wrf-chem-tools-community>

3.1.3.2 Preparación de los inventarios para `anthro_emis`

La herramienta `anthro_emis` requiere que los datos de entrada estén en un formato específico para poder procesarlos. Los inventarios de emisiones deben ser archivos NetCDF (`.nc`), ordenados como un archivo por especie. Cada archivo puede contener una o más variables con una dimensión espacial y una dimensión temporal (latitud/longitud y tiempo). En estas variables se incluyen las emisiones antropogénicas totales y/o las emisiones de los diferentes sectores/categorías, expresadas en $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$, o en moléculas $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$. La dimensión espacial debe contener dos variables unidimensionales correspondientes a la latitud y la longitud en la que se centra cada celda de la cuadrícula, las cuales deben ser monótonamente crecientes. La dimensión temporal puede adoptar dos formas:

- Incluir las variables `date` y `datesec` que determinan la fecha del inventario en formato `aaaa-mm-dd` (año-mes-día) y los segundos del día respectivamente.
- Incluir una variable `time` que represente el tiempo en días transcurrido desde una fecha de referencia determinada hasta el año base del inventario. Esta fecha debe estar contenida en el atributo `unidades` de la variable `time` y tener la forma `aaaa-mm-dd`.

Existe una gran variedad de inventarios de emisiones, tal y como se ha descrito en la Sección 3.1.1, y si bien muchas de estas bases de datos están pensadas para servir de apoyo a la modelación atmosférica, no existe un formato unificado para presentar los datos, ni están diseñadas específicamente para servir como archivos de entrada a la herramienta [anthro emis](#). Por lo tanto, a menudo se requiere un preprocesamiento de los archivos, cuya complejidad dependerá de las características específicas de cada base de datos. En esta sección se describen los métodos aplicados para los tres inventarios de emisiones utilizados en esta tesis (GEAA-AEIV3M, EDGAR v5 y EDGAR-HTAP), para lo cual fue necesario desarrollar una serie de códigos en los lenguajes [Python](#), [Bash](#) y [NCO](#). Los códigos que acompañan el preprocesamiento de los conjuntos de datos pueden encontrarse en el repositorio de esta tesis: <https://data.mendeley.com/datasets/pchm4c6369/1>

La Figura 3-5 muestra el diagrama de flujo general para el preprocesamiento de los inventarios. Los códigos de preprocesamiento se utilizan para reorganizar los datos mensuales brutos (ordenados en un archivo para cada mes, sector, especie y año), y guardarlos como un archivo `.nc` por especie que contiene las contribuciones mensuales de todos los sectores, adjudicando una variable por sector, y que conserva las mismas dimensiones espaciales (latitud/longitud) que el archivo original. A estos archivos se les incorpora la dimensión temporal (`time`), que servirá para apilar en orden los archivos generados para cada uno de los meses dentro de un solo archivo. El resultado final es el archivo llamado `<inventario>_<especie>_<año>.nc` que contiene sectores y meses completos para cada inventario por año, y está listo para ser introducido en [anthro emis](#).

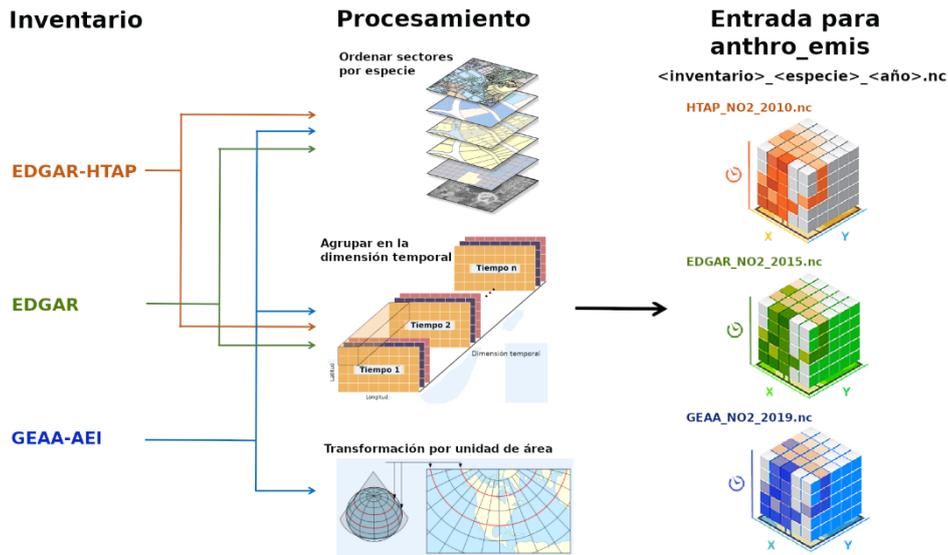


Figura 3-5. Diagrama de flujo general de la preparación de inventarios de emisiones para anthro_emis. (Elaboración propia)

- El inventario EDGAR-HTAP ha sido el primero en ser preprocesado, tiene un procedimiento menos complejo puesto que sólo contiene 7 sectores/actividades de emisión que ya están expresados en las unidades requeridas por anthro_emis ($\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$). La modificación de esta base de datos se realizó mediante una serie de comandos del programa *The NetCDF Operators* (NCO), que ofrece un conjunto de herramientas sencillas para manipular y analizar los datos almacenados en formato .nc. La secuencia de comandos utilizada para una sola especie se automatizó mediante un código en c-shell de Unix que ejecuta todos los comandos NCO en orden y utiliza un bucle para que se realice el mismo procedimiento para todas las especies del inventario. El programa completo encuentra en el archivo [htap_preprocesamiento.sh](#) del repositorio de esta tesis.
- El inventario EDGARv5 es estructuralmente idéntico a EDGAR-HTAP, pero al tener un mayor número de sectores, requiere el manejo de una mayor cantidad de información y por lo tanto un código más complejo, por lo que se decidió desarrollar un nuevo código de preprocesamiento en el lenguaje Python. El programa sigue el mismo procedimiento general de modificación de archivos descrito anteriormente y también se puede encontrar en el repositorio de la tesis en el archivo tipo IPython Notebook llamado [edgarv5_preprocesamiento.ipynb](#)
- El preprocesamiento del inventario GEAA-AEI se realiza con el código [geaa_preprocessing.ipynb](#), cuyo desarrollo implicó mayor complejidad ya que los archivos originales del inventario, a diferencia de EDGAR, contienen las emisiones expresadas en términos de flujo de masa (Mg mes^{-1}). Para ser aceptadas por el anthro_emis, las emisiones

deben ser transformadas en flujo de masa por unidad de área. Para ello, es necesario dividir la emisión reportada por la superficie de la celda correspondiente. Dado que la Tierra es un elipsoide, las distancias entre las líneas de latitud disminuyen a medida que se alejan del ecuador y se acercan a los polos, por lo que el área de cada celda va a variar según la ubicación geográfica en función del coseno de la latitud.

3.1.3.3 Anthro_emis_merge

Los archivos de emisiones antropogénicas utilizados para las simulaciones de esta tesis se generaron con la herramienta anthro_emis_merge. Se trata de una versión modificada de la herramienta anthro_emis que incluye desarrollos adicionales dentro del código fuente original para permitir una mayor flexibilidad en el redimensionamiento espacial y temporal de las emisiones y poder incluir ajustes locales más detallados definidos por el usuario dentro de los archivos wrfchemi_d*. Los principales cambios en anthro_emis_merge se han implementado a través de una nueva subrutina (rpf_local_development.f90) y las subrutinas ya existentes se han adaptado para funcionar conjuntamente con ésta. Más información sobre anthro_emis_merge, junto con los resultados preliminares de su implementación se puede encontrar en (Fernandez et al., 2017; Schiavone, 2018; Schiavone et al., 2017a; Schiavone et al., 2017b). El código fuente de anthro_emis_merge se adjunta en el repositorio de esta tesis. Se destaca que, durante esta tesis, se participó en las fases finales de dichos desarrollos.

Las modificaciones introducidas en anthro_emis_merge requieren información más detallada sobre la distribución política y los husos horarios de los distintos países. La inserción de estos datos recortados para el dominio de la simulación se realizó utilizando WPS. En el Capítulo 2 se describen las modificaciones realizadas para introducir una configuración más detallada para Sudamérica, incluyendo la inserción de las variables `POLIT_MAP` y `TIME_ZONE` en los archivos met_em.d<dominio>.<fecha>_<hora> a través del paquete geogrid de WPS, que se encarga de procesar toda la información geográfica según el dominio de simulación. Posteriormente, las nuevas variables se añaden a los archivos wrfinput_d<dominio> a través de los comandos `NCO` (ver Sección 3.1.3.4), ya que por medio de estos archivos anthro_emis_merge toma la información geográfica necesaria para redimensionar las emisiones al dominio de simulación.

La Figura 3-4 presenta el diagrama de flujo de anthro_emis_merge, resaltando en rojo las diferencias con anthro_emis que se explican con más detalle a continuación:

- El redimensionamiento espacial se ha adaptado para incluir simultáneamente archivos de entrada de diferentes bases de datos con distintas resoluciones espaciales. Esto permite al

usuario considerar dentro del mismo dominio de simulación, por ejemplo, un inventario regional de alta resolución y un inventario global para los países en los que el inventario regional no está disponible. La combinación de la información global y regional se realiza mediante la variable `POLIT_MAP`. La Figura 3-6 muestra de forma representativa cómo se aplicaría la combinación de inventarios en el cono sur, utilizando el inventario GEAA-AEI de alta resolución para Argentina y EDGAR para los demás países.

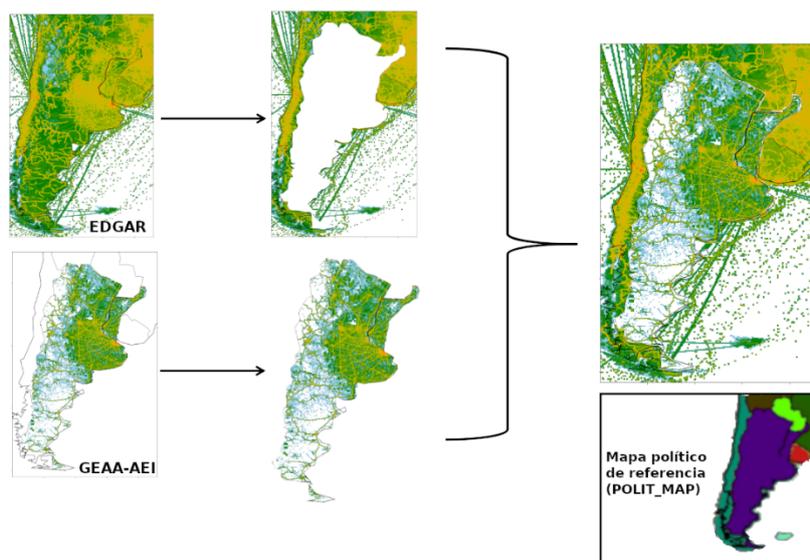


Figura 3-6. Combinación de un inventario de emisiones global (EDGAR) y uno regional (GEAA-AEI) realizada por `anthro_emis_merge` usando como base la variable `POLIT_MAP`. (Elaboración propia)

- El redimensionamiento temporal se ha adaptado para incluir perfiles horarios definidos por el usuario para las diferentes fuentes de emisión, en lugar de una emisión constante como la utilizada en `anthro_emis`, pero conservando la cantidad total de emisión diaria. Estos perfiles se introducen en `anthro_emis_merge` en forma de un vector que contiene 24 factores de variación horaria por los que se debe multiplicar la emisión, cuya suma debe ser igual a 100 para que se cumpla la conservación de la masa total de emisión. Los perfiles temporales no se asignan necesariamente por igual a todas las celdas del dominio, puede diferenciarse por sector de emisión, aplicándose sólo a las emisiones de esa actividad y dejando constantes los demás sectores. O bien se puede distinguir entre emisiones urbanas y rurales, haciendo uso de la variable `LU_INDEX` para identificar las celdas pertenecientes a cada uso del suelo. Además, la variable `TIME_ZONE` se utiliza para detectar a qué zona horaria pertenece la celda y acomodar el perfil horario para que coincida con la hora local, representando así de forma más adecuada las particularidades del comportamiento socioeconómico y cultural de cada zona. La Figura 3-7 muestra los perfiles temporales utilizados para las simulaciones de los Capítulos 5 y 6, en ellos se aplicó una variación horaria para las emisiones relacionadas con el sector del

transporte (Figura 3-7a), donde el perfil temporal para las emisiones vehiculares urbanas (Perfil urbano) se ha ajustado a un día típico de la semana en la ciudad de Buenos Aires, mientras que el perfil de las emisiones del transporte característico de las rutas nacionales y accesos a las ciudades del país (Perfil rural) se basa en encuestas origen-destino (Allende et al., 2010). Asimismo, se aplicaron perfiles temporales horarios representativos de la variación mensual y horaria de la demanda residencial de gas natural y del consumo industrial de combustibles (Figura 3-7b), obtenidos de las estadísticas nacionales de consumo energético (Pulafito et al., 2021, 2017). Todos estos perfiles deben ser definidos en la subrutina `rpf_local_development.f90`.

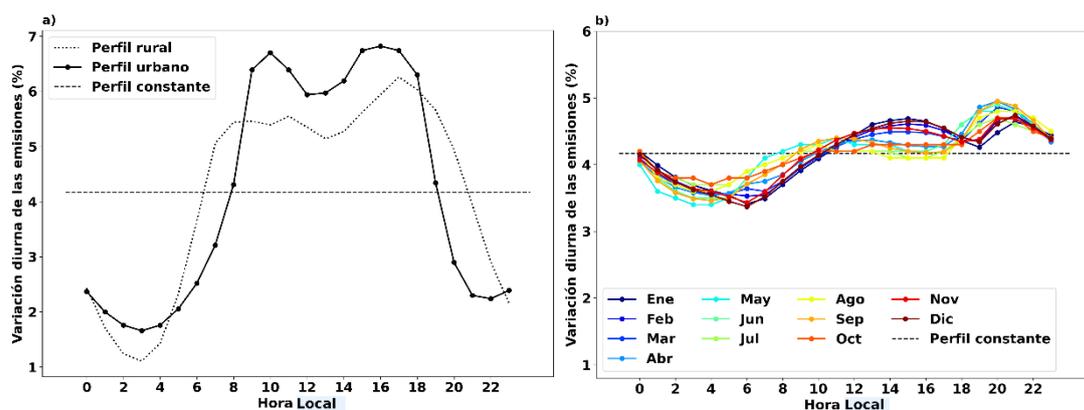


Figura 3-7. Perfil temporal horario normalizado aplicado para a) las emisiones vehiculares de las rutas nacionales y accesos a las ciudades (línea punteada) y de las rutas urbanas (línea continua), b) emisiones relacionadas con el sector energético. También se muestra la variación constante que utiliza por defecto `anthro_emis` (línea discontinua). (Elaboración propia)

- El archivo `namelist.inp` se adaptó para recibir información de más de un inventario de emisiones. La sección original `&control` de `anthro_emis` fue sustituida por dos secciones: `&control_glob` que define los parámetros para el inventario global y `&control_reg` que definirá los parámetros para el inventario regional. Los parámetros de entrada del código original (p. ej. `emiss_map`, `anthro_dir`, `subcategories`, etc.) se modificaron para cada una de las secciones añadiendo los sufijos `_glob` y `_reg` respectivamente (p. ej. `emiss_map_reg`). Por otra parte, se añadieron nuevos parámetros para indicar el número de inventarios que se van a utilizar (`nmerge`), el nombre específico de cada base de datos (`dtbs_name`), el tipo de perfil temporal que se va a aplicar (`temporal_profile_type`) y las nuevas variables que se van a leer del archivo `wrfinput_d<dominio>` (`wrf_vars = 'LANDMASK', 'LU_INDEX', 'POLIT_MAP'`).

3.1.3.4 Pasos para ejecutar anthro_emis_merge

1. Descargar el código fuente de [anthro_emis_merge](#), que se encuentra disponible en el repositorio de esta tesis a través del siguiente enlace:
<https://data.mendeley.com/datasets/pchm4c6369/1>
2. Modificar dentro de la subrutina [rpf_local_development.f90](#) los perfiles temporales que se van a utilizar, recordar que el [anthro_emis_merge](#) debe ser compilado cada vez que se realice una modificación en dicha subrutina.
3. Compilar la herramienta [anthro_emis_merge](#) siguiendo los pasos indicados en el archivo [README.anthro_emis_merge](#)
4. Utilizando el siguiente comando de [NCO](#) en una terminal Linux, proceda a copiar las variables `TIME_ZONE`, `POLIT_MAP`, `LU_INDEX` que se encuentran en los archivos [met_em.d<dominio>.<fecha>_<hora>](#) (generados con la versión modificada de WPS) hacia los archivos [wrfinput_d<dominio>](#) (generados previamente con el ejecutable WRF `real.exe`). Repetir el procedimiento para cada uno de los dominios de simulación.

```
ncks -v <variable> met_em.d<dominio>.<fecha>_<hora>.nc wrfinput_d<dominio>
```

5. Configurar el archivo de texto [namelist.inp](#) indicando la información correspondiente a las bases de datos a utilizar. Asegurarse de indicar la carpeta donde se encuentran los inventarios previamente procesados y listos para ser utilizados por [anthro_emis_merge](#), así como la ubicación de los archivos [wrfinput_d<dominio>](#) obtenidos en el paso anterior.
6. Ejecutar el [anthro_emis_merge](#) escribiendo el siguiente comando en una terminal de Linux, estando situado en la carpeta [\\$anthro_emis_merge/src/](#)

```
./anthro_emis < namelist.inp >& anthro.out
```

7. Verificar que se hayan generado correctamente los archivos [wrfchemi_*](#) y ubicarlos en la respectiva carpeta donde se llevará a cabo la simulación de WRF-Chem

3.2 Emisiones biogénicas

Las emisiones biogénicas son todas aquellas emisiones procedentes de fuentes naturales y desempeñan un papel importante en la calidad del aire regional y en la química atmosférica global, particularmente (pero no exclusivamente) en las regiones prístinas del planeta. Estas emisiones están controladas por diversas variables ambientales, como la temperatura y la radiación solar. Los modelos

numéricos consideran principalmente las emisiones procedentes de la vegetación y los suelos, cuyo principal NMVOC emitido es el isopreno (C_5H_8 , que tiene un gran impacto en el ciclo del ozono (EPA, Hu, 2015). Sin embargo, existen otras fuentes relevantes como las emisiones volcánicas, oceánicas, los rayos y la sal marina.

En la configuración por defecto de WRF-Chem solo se tienen en cuenta las emisiones biogénicas continentales y existen tres opciones para incluir estas emisiones en una simulación:

- Se introducen en el mismo archivo de entrada junto con las emisiones antropogénicas.
- Se calculan simultáneamente con la simulación sin utilizar un archivo de entrada adicional, mediante un modelo incorporado a WRF-Chem que incluye las emisiones basadas en el uso del suelo, siguiendo a (Guenther et al., 1994) y (Simpson et al., 1995).
- Se calculan *online* al realizar la simulación utilizando una versión acoplada de WRF-Chem con *the Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature* (MEGAN, (Guenther et al., 2006).

En los casos de estudio presentados en los Capítulos 5 y 6 se ha utilizado la opción MEGAN, que es un modelo para estimar la emisión de gases y aerosoles desde los ecosistemas terrestres a la atmósfera cuyos algoritmos se han integrado con WRF-Chem para generar estimaciones de emisiones en línea y simular interacciones acopladas. MEGAN cubre las emisiones de 134 especies, incluyendo isopreno (Figura 3-8), monoterpenos y sesquiterpenos (Guenther et al., 2006; Sakulyanontvittaya et al., 2008), con una resolución de 1 km x 1km.

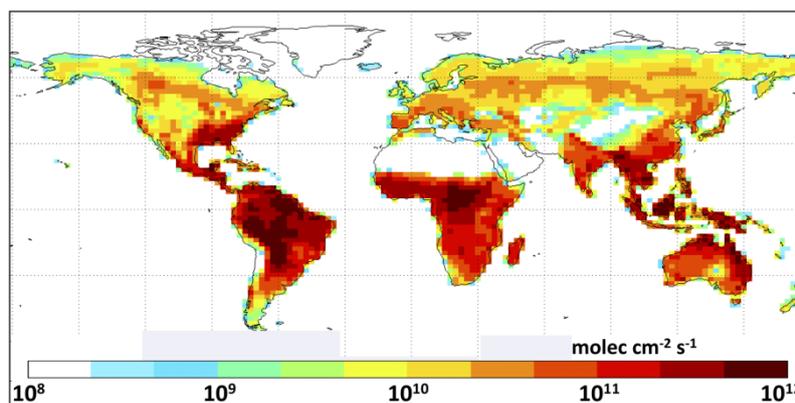


Figura 3-8. Emisiones anuales globales de isopreno generadas a partir de MEGAN (Escala logarítmica) (Bates & Jacob, 2019).

Las simulaciones realizadas con MEGAN requieren archivos de entrada adicionales llamados `wrfbiochemi_d<dominio>` que contienen información sobre factores de emisión, índice de área foliar mensual, radiación solar, temperatura, cobertura fraccional de árboles de hoja ancha y de hoja de aguja, arbustos y hierbas. Estos archivos se generan utilizando la herramienta de preprocesamiento `megan bio emis`, que de forma similar a `anthro emis` recorta la información al dominio de simulación

específico basado en los archivos `wrfinput_d<dominio>`. Una vez generados los archivos `wrfbiochemi_d<dominio>`, es necesario volver a ejecutar el programa `real.exe` para incluir en la simulación la información adicional requerida por los algoritmos de MEGAN, los cuales se incorporan como variables adicionales en los archivos `wrfinput_d<dominio>` y `wrfbdy_d<dominio>`.

Finalmente, si bien la configuración por defecto de WRF-Chem sólo incluye las emisiones biogénicas continentales, en los últimos años se han realizado importantes avances para demostrar que las emisiones oceánicas de especies reactivas de halógenos, que incluyen Cl, Br o I, también tienen un impacto considerable en la química y la capacidad oxidativa troposférica, particularmente en regiones costeras (Badia et al., 2019; Fernandez et al., 2014; Li et al., 2021; Saiz-Lopez & Von Glasow, 2012). Durante la pasantía de investigación en el IQFR-CSIC, fue posible trabajar en la inclusión de las emisiones oceánicas en el modelo WRF-Chem-KPP, particularmente aprendiendo sobre las especies halógenas reactivas que contienen cloro (Cl), bromo (Br) o yodo (I) las cuales son emitidas desde el océano a la atmósfera. En este sentido se trabajó con una configuración más avanzada del modelo WRF-Chem-KPP (con halógenos) y una versión modificada de `megan_bio_emis` desarrollada previamente en dicho grupo. Cabe destacar que las modificaciones incorporadas a `anthro_emiss_merge` permiten incorporar dichas emisiones oceánicas de especies halogenadas a los `wrfchemi_d*`, incluyendo perfiles de emisión horarios en función de la radiación solar incidente en reemplazo de los husos horarios descritos en la Sección 3.1.3.3 para las emisiones antropogénicas (Schiavone, 2018). Más información sobre los conocimientos adquiridos durante la estancia de investigación que se realizó en el IQFR-CSIC se documenta en el Anexo A.1.

3.3 Emisiones por quema de biomasa

Las emisiones procedentes de la quema de biomasa son aquellas generadas por la quema de vegetación viva o muerta, incluidos los pastizales, los bosques y los residuos agrícolas. Los incendios pueden ser naturales o inducidos por el hombre. Los incendios provocados por el hombre incluyen la quema de vegetación para el desmonte y el cambio de uso del suelo y la quema de leña, mientras que los incendios naturales incluyen los provocados por los rayos. Estas emisiones contribuyen a los problemas de calidad del aire (p. ej., a la generación de aerosoles degradando la visibilidad o liberando NMVOCs, que en presencia de un elevado nivel de NO_x reaccionan fotoquímicamente y contribuyen a la formación de ozono) y a los forzamientos climáticos locales, regionales y globales (p. ej., el dióxido de carbono liberado a la atmósfera por la quema a gran escala puede tener importantes implicaciones en el ciclo del carbono) (Crutzen & Andreae, 1990; Wiedinmyer et al., 2011; Wiedinmyer & Neff, 2007; Yadav & Devi, 2019). Por lo tanto, es de suma importancia que estas sean consideradas a la hora de realizar simulaciones de la calidad del aire y la química atmosférica.

El modelo WRF-Chem contiene dentro de sus opciones predeterminadas una parametrización para el cálculo de la liberación de las emisiones de la quema de biomasa y el ascenso de la pluma en función de la meteorología simulada (Grell et al., 2011). Para realizar este cálculo, el modelo necesita los archivos de entrada `wrffirechemi_d<dominio>`, que contienen la localización del incendio y la cantidad de especies emitidas. La salida del modelo FINN (Fire INventory from NCAR, Version 1.5) (Wiedinmyer et al., 2011) puede utilizarse para proporcionar datos de emisiones de incendios para una simulación WRF-Chem. Este modelo utiliza estimaciones globales de emisiones de gases traza y partículas procedentes de la quema de biomasa al aire libre, que incluye los incendios forestales, los incendios agrícolas y las quemaduras prescritas, pero no incluye el uso de biocombustibles ni la quema de basura. La salida proporciona estimaciones de las emisiones de los incendios y variables relacionadas con el tamaño del fuego y el tipo de cobertura vegetal, así como estimaciones globales de compuestos orgánicos clave como el formaldehído y el metanol con una resolución de 0.1° x 0.1°. Esta información puede descargarse en <https://www.acom.ucar.edu/Data/fire/> y mapearse a un dominio WRF-Chem a través del preprocesador de emisiones `fire_emis` para generar archivos `wrffirechemi_d<dominio>`.

A diferencia de las emisiones antropogénicas, los datos de FINN no requieren un preprocesamiento para ser utilizados en `fire_emis`, aunque si se realizaron pequeñas modificaciones en las tablas de especiación de la herramienta para su uso en las simulaciones de esta tesis (para una descripción más detallada, ver el trabajo Lopez-Noreña et al. (2019a) citado en el Anexo A.3). El rendimiento del modelo con esta configuración se probó en el marco de la colaboración con otros proyectos del grupo GEAA-UTN realizados paralelamente al desarrollo de esta tesis, donde se llevaron a cabo simulaciones con activación/desactivación de las emisiones por quema de biomasa para analizar su impacto sobre la cobertura de nieve en los Andes centrales. Para más información sobre dicho trabajo ver Anexo A.2.2. y (Bolaño-Ortiz et al., 2019).

En el caso de estudio sub-regional presentado en el Capítulo 5, se utilizó la configuración estándar del WRF-Chem para las emisiones procedentes de la quema de biomasa (preprocesador `fire_emis` junto con la base de datos FINN). El área de estudio y la fecha analizada teóricamente no presentan una influencia significativa de este tipo de emisiones, sin embargo, era necesario considerarlas para tener una representación completa del contexto atmosférico. En el Capítulo 6, en cambio, se ha desactivado esta configuración y se han utilizado las emisiones procedentes de la quema de biomasa del inventario GEAA-AEI para poder comparar las contribuciones de los distintos sectores manteniendo la misma resolución espacial en los archivos de entrada.

4 Observaciones disponibles y metodología de validación

La gestión de la calidad del aire abarca todas las actividades que se llevan a cabo para ayudar a proteger la salud humana y el medio ambiente de los efectos nocivos de la contaminación atmosférica. Este proceso de gestión se compone de una serie de elementos interrelacionados, por ejemplo, el inventario de emisiones, las herramientas de predicción y previsión, las herramientas de monitoreo y las estrategias de control (Gulia et al., 2015). Cada uno de estos componentes desempeña un papel importante en la mejora de la eficacia de la gestión, reduciendo así las concentraciones de contaminantes. En particular, la simulación numérica, como herramienta de predicción y previsión, representa una componente clave de la gestión de la calidad del aire, ya que el uso de los datos generados por los sistemas de medición y monitoreo de contaminantes por si solos resultan insuficientes para establecer una representación espacio-temporal detallada de los episodios de contaminación (Janssen et al., 2008). El uso de modelos numéricos en la gestión de la calidad del aire también permite diseñar y probar diferentes escenarios, lo que puede utilizarse, por ejemplo, para identificar las contribuciones de las fuentes, evaluar si se superarán las normas de calidad del aire bajo determinadas condiciones, o predecir las futuras concentraciones de contaminantes procedentes de múltiples fuentes tras la aplicación de un nuevo programa normativo. De este modo, se facilita la toma de decisiones y se mejora la eficacia del programa para reducir las exposiciones nocivas para los seres humanos y el medio ambiente.

Un modelo numérico debe pasar por varias etapas antes de ser completamente utilizado operativamente como herramienta para el análisis de una situación real o para la toma de decisiones basadas en diferentes escenarios. Estas etapas son: configuración, calibración, validación y análisis de sensibilidad (Oberkampff et al., 2004).

- Configuración: En esta etapa se genera un modelo individualizado a partir de un modelo configurable resolviendo cada uno de los puntos de variación del modelo configurable, en el caso de WRF-Chem implica la selección de las parametrizaciones físicas y químicas más adecuadas para el problema a estudiar.
- Calibración: Es el proceso de ajustar las constantes, la resolución espacio-temporal y otros parámetros del modelo para replicar los datos observados para una situación específica. Esta etapa busca mejorar el rendimiento del modelo y producir un resultado más razonable. En el caso de WRF-Chem, el modelo se optimiza, por ejemplo, mediante la inclusión de bases de datos estáticas y dinámicas con la mejor resolución disponible para la zona de estudio.

- Validación: Los resultados del modelo calibrado se comparan con los datos observados para verificar que el modelo tiene un rango de precisión satisfactorio y una representación del sistema real coherente con la aplicación elegida para el modelo. En otras palabras, se evalúa el desempeño del modelo en relación con las observaciones.
- Análisis de sensibilidad: Consiste en aplicar el modelo utilizando entradas o supuestos alternativos para determinar si los resultados del modelo siguen siendo plausibles y razonables, o si el modelo está sobre calibrado para un escenario concreto. De este modo, se evalúa en qué medida las variaciones de los distintos parámetros individuales pueden afectar a los resultados del modelo en su conjunto.

Los pasos mencionados constituyen un proceso iterativo que tiene lugar a lo largo del desarrollo del modelo, con el propósito final de demostrar que el modelo y sus parámetros son razonablemente representativos de la realidad. La evaluación del rendimiento de un modelo suele realizarse mediante métodos gráficos y estadísticos (EPA, 1991), generalmente comparando con observaciones terrestres (*in situ*) o aéreas. Sin embargo, este procedimiento suele verse limitado por el tiempo y la disponibilidad de datos observados con los que realizar la comparación (Jiménez Mejía, 2016; Oberkampf et al., 2004). En muchas ocasiones, la información proporcionada por las redes de monitoreo de la calidad del aire es escasa, incompleta o no está disponible, la información proviene de campañas de medición llevadas a cabo durante períodos cortos de tiempo, con una cobertura geográfica limitada, o no se dispone de una red de monitoreo establecida con la que comparar. Además, las mediciones puntuales por sí solas no pueden proporcionar información acerca de la variabilidad espacial de las concentraciones y, por lo tanto, a menudo se necesita información adicional para comprender adecuadamente los patrones espaciales de la contaminación (Garaga et al., 2018; Geng et al., 2015). En los últimos años, las mediciones satelitales han demostrado ser herramientas efectivas para la gestión de la calidad del aire, resultando de utilidad, entre otras cosas, para la evaluación de los modelos de transporte químico (Duncan et al., 2014; Martin, 2008; Shahid et al., 2021), particularmente en regiones donde las observaciones terrestres/aéreas son limitadas, como es el caso de Argentina. En este capítulo se presenta una descripción de las observaciones *in situ* y de los datos satelitales, así como los métodos estadísticos utilizados a lo largo de esta tesis para la evaluación de la configuración específica del modelo WRF-Chem-KPP, que se ha descrito en los capítulos anteriores.

4.1 Monitoreo de la calidad del aire en Argentina

En los últimos años, el estudio de los contaminantes atmosféricos en Argentina ha ido creciendo en importancia. Esto, ha llevado al surgimiento de iniciativas de monitoreo regional/local que permiten conocer el comportamiento de la calidad del aire en determinados puntos críticos. Estas iniciativas surgen generalmente en las principales ciudades del país donde hay una gran concentración de

población, por ejemplo, en la Ciudad Autónoma de Buenos Aires (CABA) y en la ciudad de Córdoba. También pueden estar relacionadas con la localización de una actividad industrial específica, como es el caso de la información monitoreada en dos de los mayores polos petroquímicos del país (Dock Sud y Bahía Blanca) y en el complejo industrial de Zárate Campana, ubicados en la provincia de Buenos Aires. Según el informe del estado del medio ambiente en Argentina (Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible de la Nación, 2021), los siguientes son los lugares que cuentan con estaciones de control que cumplen con las metodologías y procedimientos establecidos por la agencia de protección ambiental de los Estados Unidos (EPA):

- En CABA, la Agencia de Protección Ambiental (APRA) maneja tres estaciones de monitoreo automático que funcionan simultáneamente desde 2009 y reportan de manera diaria y mensual los niveles de concentración ambiental de CO, NO₂ y PM₁₀ (<https://data.buenosaires.gob.ar/dataset/calidad-aire>)
- La información del polo petroquímico Avellaneda-Dock sud está a cargo de la Autoridad de la Cuenca Matanza Riachuelo (ACUMAR), que lleva adelante tareas de monitoreo de calidad del aire en distintos sitios de la cuenca desde el año 2010. ACUMAR cuenta actualmente con dos cabinas automáticas de monitoreo continuo (EMC-I y EMC-II) de contaminantes criterio y meteorología, junto con dos equipos de tecnología *Open Path* que miden las concentraciones de gases atmosféricos por Espectroscopía de Absorción Óptica Diferencial (DOAS). (<https://www.acumar.gob.ar/monitoreo-ambiental/calidad-de-aire/>)
- En Bahía Blanca funciona la EMCABB (Estación de Monitoreo Continuo del aire de Bahía Blanca), una cabina móvil de monitoreo automático que mide CO, NO_x, SO₂, O₃ y PM₁₀. La estación comenzó a funcionar en febrero de 1997, y ha pasado por varias ubicaciones con el objetivo de monitorear la calidad del aire en la zona cercana a las industrias petroquímicas y refinerías de Ingeniero White. Sin embargo, desde 2009 hasta la actualidad ha permanecido fija en el consorcio del parque industrial. (<https://www.bahia.gob.ar/cte/calidadaire/estacionmonitoreo/>)
- En Campana-Zárate se monitorea la calidad del aire del complejo industrial de la zona, a través del Convenio de Monitoreo de Calidad de Aire Campana - Zárate suscripto en el año 2013, entre el Organismo Provincial para el Desarrollo Sostenible, las Municipalidades de Campana y Zárate, y el Comité Interindustrial para la Conservación del Ambiente Campana Zárate (CICACZ). El sistema de monitoreo continuo está compuesto por una estación central de recolección y procesamiento de datos ubicada en la Subsecretaría de Medio Ambiente de la Municipalidad de Campana, y tres estaciones remotas de monitoreo (homologadas por la EPA) a partir de las cuales se realiza un reporte anual del índice de calidad del aire para los contaminantes CO, PM₁₀, O₃, SO₂ y NO_x. (<https://www.cicacz.com.ar/airecont.html>)

Adicionalmente al registro de datos en la provincia de Buenos Aires, en otras zonas del país, como Córdoba, Mendoza, Bariloche y Tierra del Fuego, se han implementado también otras estaciones de monitoreo con distintos propósitos y alcances:

- La Municipalidad de Córdoba y el Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental - Universidad Tecnológica Nacional, disponen de una estación de calidad del aire, instalada en la zona céntrica de la ciudad que funciona desde septiembre de 2018. Esta estación cuenta con equipos homologados por las normas de la EPA, y mide los contaminantes criterio PM₁₀, CO, NO_x y O₃.
(<https://gobiernoabierto.cordoba.gob.ar/data/datos-abiertos/categoria/calidad-del-aire/informes-de-calidad-del-aire/2832>)
- La provincia de Mendoza, a través del Área de Contaminación Atmosférica de la Dirección de Protección Ambiental, Secretaría de Ambiente y Ordenamiento Territorial, opera una unidad móvil de monitoreo instalada en el microcentro de la ciudad de Mendoza. Esta estación móvil cuenta con equipos de monitoreo en tiempo real y mide los contaminantes criterio PM₁₀, CO, NO_x y O₃. Esta estación, sin embargo, no realiza un monitoreo continuo, sino que sólo cuenta con mediciones horarias intermitentes para períodos específicos de los años 2016, 2017, 2018 y 2020. Los datos registrados por esta estación están disponibles en <http://datosabiertos.mendoza.gov.ar/dataset/calidad-del-aire>.
- El centro de monitoreo de la Municipalidad de Bariloche y la Secretaría de Ambiente y Cambio Climático de la Provincia de Río Negro, mantuvieron hasta el año 2019 una estación de monitoreo continuo de la calidad del aire que mide NO₂, NO, NO_x, SO₂, H₂S, CO, PM₁₀, PM_{2.5} y O₃. Esta estación se encuentra actualmente inhabilitada por trabajos de reparación y mantenimiento.
- Finalmente, en Tierra del Fuego, a unos 10 km de la ciudad de Ushuaia, se encuentra la estación de Vigilancia Atmosférica Global (GAW), que es operada desde 1994 por el Servicio Meteorológico Nacional (SMN) como parte de un proyecto en colaboración con la NOAA (*National Oceanic and Atmospheric Administration*) de los Estados Unidos. Está situada en una región considerada libre de la influencia de los contaminantes locales debido a su entorno natural y a los vientos dominantes, por lo que esta estación se utiliza para medir las condiciones de base del planeta para los gases de efecto invernadero CO₂, CH₄, N₂O.

Además de los esfuerzos de monitoreo llevados a cabo en varias ciudades importantes del país, como se mencionó en las iniciativas anteriores, históricamente también ha habido varios aportes para visibilizar y controlar los crecientes problemas de contaminación en Argentina. Estos esfuerzos provienen de trabajos de investigación que han abordado diversas temáticas en todo el país desarrollando campañas de medición puntuales que buscan estudiar determinadas circunstancias o

lugares específicos. Entre estos estudios, se incluyen la medición y evaluación de contaminantes gaseosos primarios y secundarios (como el O_3 y otros contaminantes provenientes de fuentes industriales intensivas e intermedias, emisiones de tráfico y fuentes residenciales) (Bogo, 1999; Bogo et al., 2003; Fernández et al., 2021; Olcese & Toselli, 2002; Pineda Rojas et al., 2020; Puliafito et al., 1998, 2003; Reich et al., 2006; Venegas & Mazzeo, 2010), y la caracterización del comportamiento y composición química de los aerosoles (Achad et al., 2014; Diaz Resquin et al., 2018; Gassó & Torres, 2019; Gómez et al., 2017; Jasan et al., 2009; Mateos et al., 2018; Ristori, 2003). Otros estudios sobre la calidad del aire urbana en Argentina se han centrado en la evaluación de las concentraciones superficiales de las especies críticas con respecto a los umbrales reglamentarios locales e internacionales, así como en la determinación del tamaño y la densidad de una red de calidad del aire adecuada para la vigilancia (Ratto et al., 2018; Venegas & Mazzeo, 2010). Aunque los esfuerzos van en aumento, el país no dispone actualmente de la infraestructura necesaria para establecer una red de vigilancia continua a escala nacional. Existe una ausencia generalizada de un sistema de gestión de la calidad del aire operativo como recurso nacional, ya que muchas de las iniciativas registradas tienen diversas limitaciones. Por ejemplo, corresponden a campañas de medición durante períodos de tiempo cortos y discontinuos, los datos medidos pertenecen a una institución privada o no están disponibles en absoluto. Además, algunas de las estaciones han sido trasladadas a lo largo del tiempo para obtener una mejor descripción espacial, lo que compromete la geo-correspondencia temporal de los datos. En este contexto, Buenos Aires se destaca como una excepción, al contar con el registro de observaciones continuas más completo del país. Esto la convierte en un lugar propicio para validar los resultados del modelo, por lo que ha sido seleccionada para centrar el caso de estudio sub-regional que se presenta en el Capítulo 5.

4.2 Observaciones in situ en Buenos Aires

La configuración de alta resolución del modelo WRF-Chem se ha comparado con distintas observaciones meteorológicas y de contaminantes atmosféricos provenientes de 5 estaciones de monitoreo, cuyas ubicaciones y coordenadas geográficas se muestran con círculos numerados en la Figura 4-1 y se explicitan en la Tabla 4-1, respectivamente. Las estaciones identificadas con círculos de color violeta: Córdoba (1), Centenario (2) y La Boca (3), están ubicadas en el centro de CABA, pertenecen a la red de monitoreo de la calidad del aire urbano del gobierno de Buenos Aires, y recopilan exclusivamente datos de contaminantes atmosféricos (PM_{10} , NO_2 y CO). La estación Córdoba está ubicada en una zona residencial-comercial con alto flujo vehicular y baja incidencia de fuentes estacionarias (ver Capítulo 3). La estación Centenario se encuentra cerca de un gran parque urbano. La estación de La Boca está situada junto a una autopista y un conjunto de centrales térmicas. La estación EMC-I (4), identificada con un círculo de color naranja, pertenece a la red de monitoreo de calidad de

aire operada por ACUMAR. Esta estación semiurbana/industrial está ubicada dentro de un complejo petroquímico en Avellaneda-Dock Sud, y proporciona mediciones de campos meteorológicos, así como de contaminantes atmosféricos (PM₁₀, PM_{2.5}, NO₂, O₃). Por último, la estación AEP (5), identificada con un círculo amarillo, es una estación que reporta únicamente información meteorológica y está ubicada en el aeropuerto de tráfico nacional e internacional del Área Metropolitana de Buenos Aires (AMBA), Aeroparque Metropolitano Jorge Newbery. Todas las estaciones mencionadas están totalmente automatizadas, calibradas y validadas para cumplir con los requisitos establecidos por la OMS y la EPA. Para información adicional sobre la ubicación de las estaciones de monitoreo ver la Tabla 4-1.

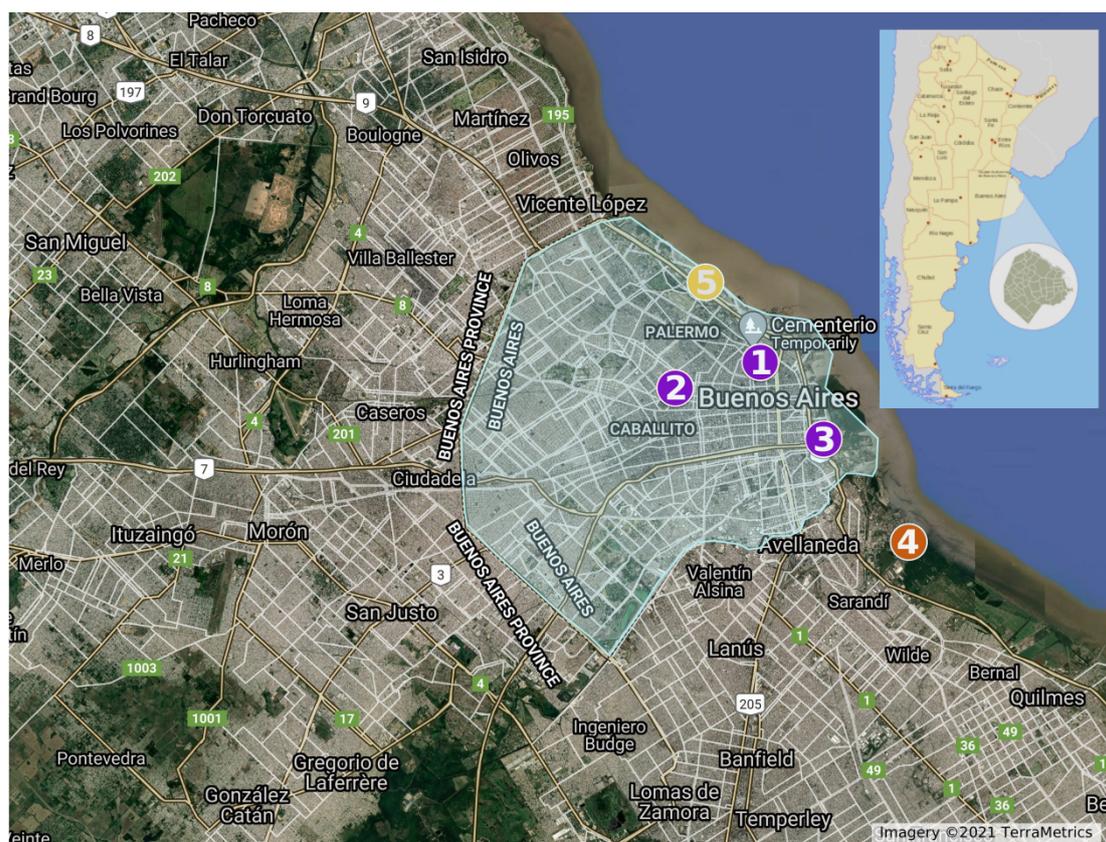


Figura 4-1. Ubicación de las estaciones de monitoreo de meteorología y calidad del aire dentro de CABA. (Elaboración propia)

Tabla 4-1 Ubicación de las estaciones de monitoreo ^{a,b,c}

Nombre de la estación	Coordenadas geográficas	Dirección
Córdoba (1)	34°35'24" S, 58°23'24" W	Esquina de Av. Córdoba y Rodríguez Peña
Centenario (2)	34°36' S, 58°25'48" W	Calle Ramos Mejía 800
La Boca (3)	34°37'12" S, 58°21'36" W	Av. Brasil 100
EMC-I (4)	34°39'36" S, 58°19'12" W	Avellaneda-Dock Sud
AEP (5)	34°33'33.05" S, 58°24'56.2" W	Aeroparque Jorge Newbery

^a Red de calidad del aire de CABA; <https://www.buenosaires.gob.ar/agenciaambiental/controlambiental>

^b Red de calidad de aire ACUMAR; www.acumar.gob.ar/

^c Los números entre paréntesis se refieren a los puntos indicados en la Figura 4-1

4.2.1 Selección del periodo de validación

Para el análisis se tomó en cuenta el periodo mayo/junio de 2018, tanto por la disponibilidad de datos observacionales/satelitales como por tratarse de una estación del año intermedia (otoño en el hemisferio sur). Es importante destacar que durante este periodo no se registraron eventos meteorológicos extremos que excedieran los valores típicos observados para esos meses. Posteriormente, se procedió a elegir una ventana temporal de simulación de 20 días, que fuera representativa de las condiciones meteorológicas imperantes en CABA durante dicho periodo. Para ello, se analizaron y clasificaron los datos de velocidad y dirección del viento observados en los sitios de monitoreo EMC-I y AEP siguiendo la categorización propuesta por Pineda Rojas et al. (2020). Estas categorías fueron obtenidas a partir de una metodología de agrupación que se utilizó originalmente para estudiar la relación entre las altas concentraciones de PM₁₀ y la meteorología de superficie en Buenos Aires. El análisis de agrupación se basa en un algoritmo de *k-means* para clasificar los días con patrones de viento en superficie similares. Utilizando este algoritmo, Pineda Rojas et al. (2020) identificaron cinco tipos de comportamientos que tienen diferentes características e influencia sobre los datos de calidad del aire, en una serie temporal de 8 años (2010-2018).

Las rosas de viento graficadas con las series de tiempo meteorológicas de las estaciones AEP y EMC-I se muestran en la Figura 4-2. Particularmente, se seleccionó la estación AEP debido a la falta de observaciones meteorológicas en los sitios de monitoreo de CABA, y considerando su cercanía a dichas estaciones. La Figura 4-2a indica que el período entre el 20 de mayo y el 8 de junio de 2018 en AEP corresponde principalmente a los grupos 4 y 5 (como se definen en (Pineda Rojas et al., 2020)), donde los vientos predominantes presentaron velocidades relativamente bajas y vinieron del noroeste (NW) y sur-sureste SSE. La estación EMC-I (Figura 4-2b) mostró principalmente características de los grupos 1 y 4, donde, además de los vientos del NW, también hay influencia del NE y ENE. Finalmente, es importante señalar que los resultados obtenidos por Pineda Rojas et al. (2020) reflejan las características de secuencias horarias generadas exclusivamente a partir de la estación AEP.

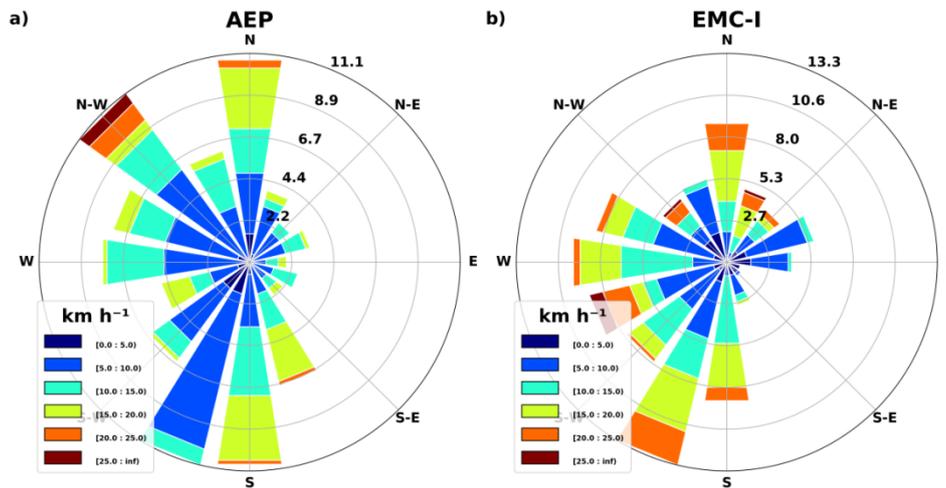


Figura 4-2. Rosas de viento para las dos estaciones con datos meteorológicos. a) AEP, b) EMC-I para el periodo de tiempo entre el 20 de mayo y el 8 de junio de 2018. (Elaboración propia)

Para evaluar el rendimiento del modelo en el centro de la ciudad, se calculó el promedio de las observaciones de PM_{10} y NO_2 para las tres estaciones de monitoreo de la red CABA (Córdoba (1), La Boca (3) y Centenario (2)). Estas estaciones, están ubicadas relativamente cerca entre sí, sin superar más de dos puntos de cuadrícula de distancia dentro de la resolución de cuadrícula más fina utilizada en esta tesis (1.3 km x 1.3 km). Además, las tres estaciones están contenidas dentro de la pluma de contaminación del centro de Buenos Aires según indican los dos inventarios de emisiones utilizados (ver Figura 5-1). Por lo tanto, para compensar los datos faltantes y tener una serie de tiempo completa para comparar con el modelo, se optó por calcular el promedio de estas tres estaciones de monitoreo, a partir de ahora denominado CBC. Para validar esta aproximación, se realizó la comparación histórica de las series temporales de NO_2 y PM_{10} para los años 2017, 2018 y 2019, que se presenta en la Figura 4-3. También se compararon los comportamientos estacionales de estas especies durante todos los meses de 2018 (Figura 4-4 y Figura 4-5). Se pudo observar que los promedios estadísticos de PM_{10} y NO_2 son similares en las tres estaciones de la CABA, tanto en el análisis histórico como en el período de simulación. Adicionalmente, en la Figura 4-6 se muestran los ciclos diurnos promedio calculados durante el periodo de simulación para las tres estaciones y para el promedio CBC. El sombreado representa la variabilidad de la serie promedio (media +/- desviación estándar), como se puede observar los ciclos diurnos promedio de las tres estaciones están contenidos dentro de esta variabilidad. Finalmente, la estación EMC-I de la red ACUMAR fue tratada de manera independiente debido a que forma parte de una red de monitoreo distinta, representativa de un entorno semiurbano/industrial y se encuentra ubicada a mayor distancia de las demás estaciones. Además, es la única que ofrece datos sobre las concentraciones de las especies $PM_{2.5}$ y O_3 .

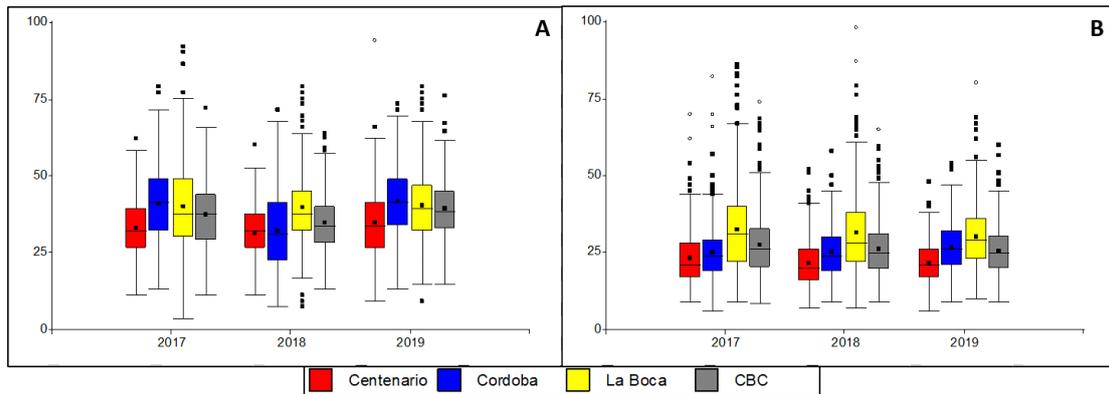


Figura 4-3. Diagrama de cajas de las series de tiempo diarias para las concentraciones de a) NO₂ (μg m⁻³) y b) PM₁₀ (μg m⁻³) en las tres estaciones de CABA analizadas: Centenario (rojo), Córdoba (azul) y La Boca (amarillo), durante los años 2017, 2018 y 2019. La media para las tres estaciones (CBC) se muestra en gris. (Elaboración propia)

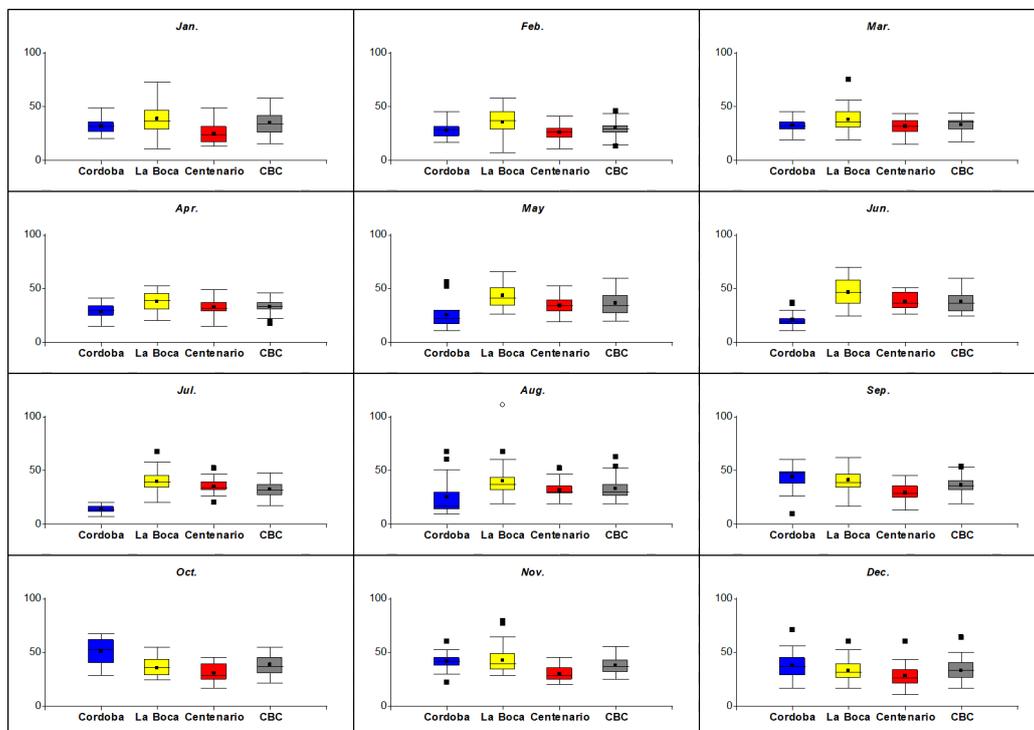


Figura 4-4. Diagrama de cajas de las concentraciones mensuales de NO₂ (μg m⁻³) en las tres estaciones de CABA analizadas: Centenario (rojo), Córdoba (azul) y La Boca (amarillo), durante el año 2018. La media para las tres estaciones (CBC) se muestra en gris. (Elaboración propia)

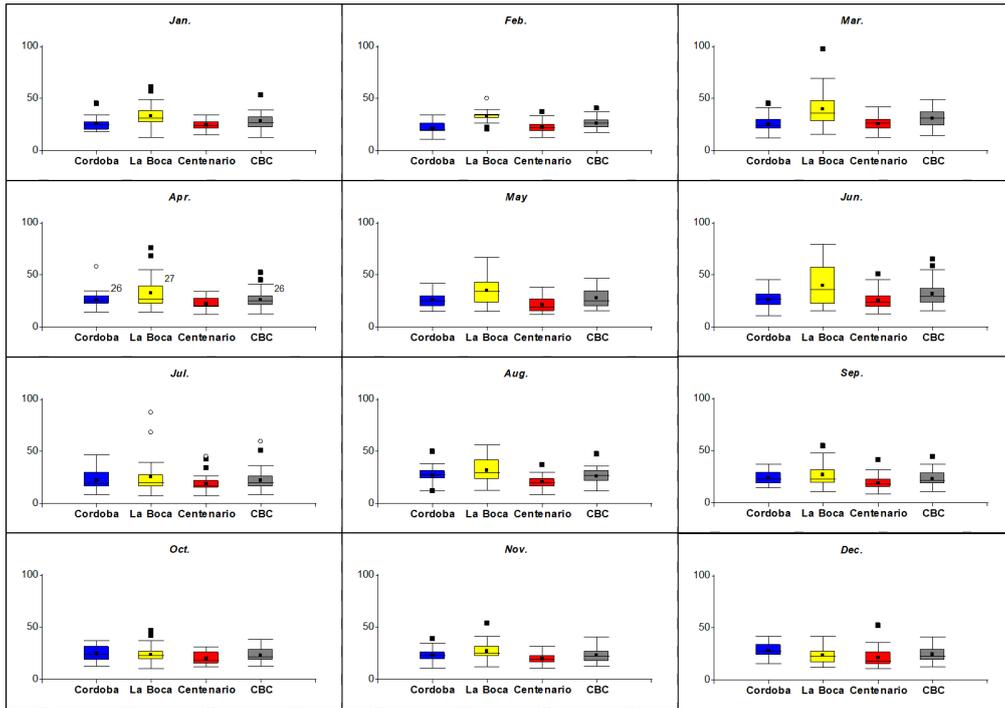


Figura 4-5. Diagrama de cajas de las concentraciones mensuales de PM_{10} ($\mu g m^{-3}$) en las tres estaciones de CABA analizadas: Centenario (rojo), Córdoba (azul) y La Boca (amarillo), durante el año 2018. La media para las tres estaciones (CBC) se muestra en gris. (Elaboración propia)

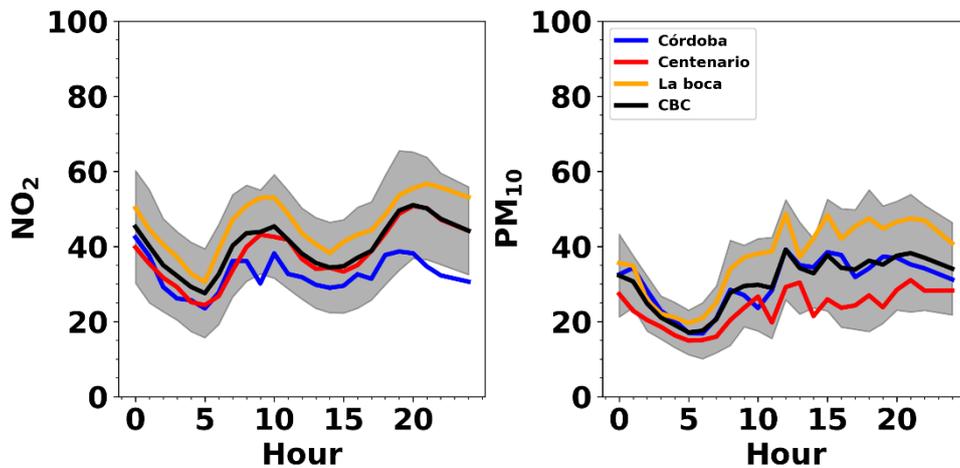


Figura 4-6. Ciclos diarios promedio de NO_2 y PM_{10} durante el periodo de simulación en las estaciones de CABA analizadas: Centenario (rojo), Córdoba (azul) y La Boca (amarillo). La media para las tres estaciones (CBC) se muestra en negro

Cabe destacar que, durante el período de tiempo seleccionado para la simulación, no hubo estaciones que superaran los límites de las normas nacionales e internacionales de calidad del aire para las especies de PM_{10} , NO_2 y O_3 . Sin embargo, en el caso del $PM_{2.5}$ (estación EMC-I), se registraron 4 días dentro del periodo de simulación donde los valores diarios excedieron la norma internacional para el promedio de 24 horas. La Tabla 4-2 muestra los umbrales de referencia para gases y aerosoles, establecidos por la OMS (2021) a nivel internacional, y los umbrales de referencia establecidos por

Decreto 1074 / 2018 para la protección a las fuentes de provisión y a los cursos y cuerpos receptores de agua y la atmósfera.

Tabla 4-2. Umbrales de referencia establecidos por la OMS (2021) y el Decreto 1074/2018 para los contaminantes NO₂, O₃, PM₁₀ y PM_{2.5}

Especie	Tiempo promediado	Valor en OMS ($\mu\text{g m}^{-3}$)	Valor en CABA ($\mu\text{g m}^{-3}$)
NO ₂	Anual	10	100
	1h	200	
O ₃	8h	100	157
	1h	200	235
PM ₁₀	Anual	15	50
	24h	50	150
PM _{2.5}	Anual	5	12
	24h	15	35

4.3 Datos satelitales

Además de las observaciones superficiales, en la presente tesis se utilizaron los datos de la columna troposférica de NO₂ obtenidos por el sensor *TROPospheric Monitoring Instrument* (TROPOMI) a bordo del satélite Copernicus-Sentinel-5P (S5P), con el fin de compararlos con las simulaciones obtenidas con el modelo WRF-Chem para los casos de estudio centrado en CABA (Capítulo 5) y a escala regional (Capítulo 6).

El S5P es un satélite lanzado en octubre de 2017 por la Agencia Espacial Europea (ESA) y el programa Copernicus. Este satélite opera en una órbita sincrónica casi polar y vuela a una altitud de 817 km con un ciclo de repetición de 17 días. La carga útil principal de la misión es el instrumento TROPOMI (Veeffkind et al., 2012), dedicado a la observación global de la composición atmosférica y a la vigilancia de la contaminación del aire y del clima. Este instrumento mide compuestos atmosféricos como O₃, NO₂, SO₂, CO, CH₄, CH₂O entre otras variables y proporciona una mejor resolución espacial que su predecesor, el sensor OMI a bordo del satélite Aura. TROPOMI funciona en una configuración de escoba de empuje sin escaneo, con un campo de visión instantáneo de 108° y un período de medición de aproximadamente 1 segundo. De este modo, se obtiene un ancho de barrido de 2.600 km en la superficie de la tierra, una resolución a lo largo de la pista de 7 km y una cobertura global diaria (ver Figura 4-7). Sus cuatro espectrómetros independientes miden las bandas espectrales ultravioleta (UV), UV-visible (UVIS), infrarrojo cercano (NIR) e infrarrojo de longitud de onda corta (SWIR).

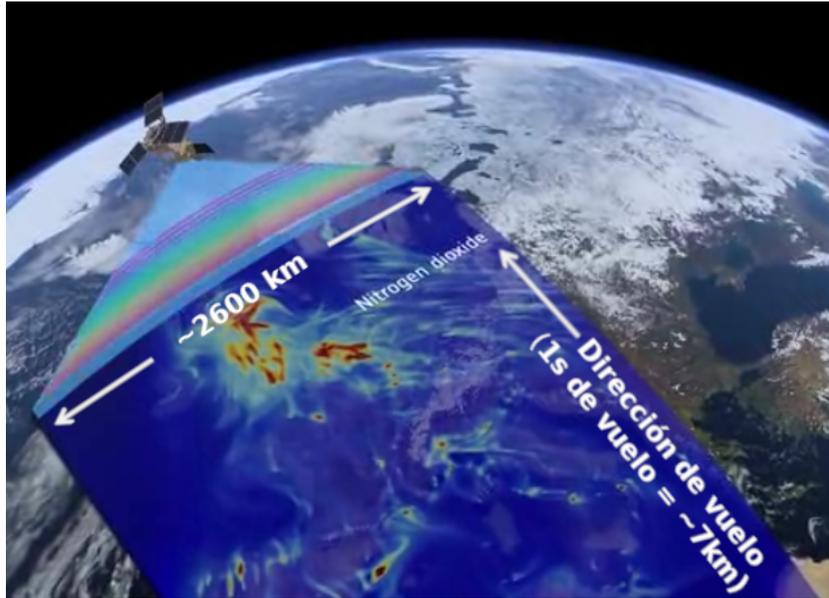


Figura 4-7. Principio de medición de TROPOMI. (Adaptada de Veeffkind et al. (2012))

Los conjuntos de datos obtenidos de la teledetección por satélite pueden tener distintos niveles de procesamiento que van desde el nivel 0 al nivel 4. A continuación, se describen las definiciones del nivel de procesamiento de los datos siguiendo los lineamientos proporcionados por la National Aeronautics and Space Administration de los estados unidos (NASA, <https://www.earthdata.nasa.gov/engage/open-data-services-and-software/data-information-policy/data-levels>).

- El nivel 0 hace referencia a los datos brutos con la resolución completa del instrumento, cuanto mayor es el nivel a los datos se les agregan parámetros y formatos más útiles.
- El nivel 1A (L1A) contiene datos instrumentales reconstruidos, sin procesar, referenciados en el tiempo que incluyen información auxiliar como los coeficientes de calibración radiométrica y geométrica y los parámetros de georreferenciación. Los datos L1B son datos L1A que han sido procesados en las unidades del sensor. Los datos L1C son datos L1B que incluyen nuevas variables que describen los espectros y permiten identificar que canales han sido copiados directamente de los datos L1B y cuáles han sido sintetizados.
- El nivel 2 (L2) incluye los datos de las variables geofísicas derivadas con la misma resolución y localización que los datos fuente L1. Los datos L2A contienen información derivada de los datos de los sensores geolocalizados, como la elevación del terreno, métricas de altura relativa y otras métricas derivadas de la forma de onda que describen la superficie interceptada. Los datos L2B son datos L2A que han sido procesados en las unidades del sensor.
- El nivel 3 (L3) incluye las variables cartografiadas en una cuadrícula espacio-temporal uniforme. Los datos L3A suelen ser resúmenes periódicos (semanales, decenales, mensuales) de los productos L2.

- Los datos nivel 4 (L4) incluyen otros productos derivados o resultados del análisis de múltiples productos de los niveles inferiores. Junto con las respectivas estimaciones de incertidumbre.

En este trabajo se utilizó el producto de columna troposférica de NO₂ nivel 2, que proporciona la columna total de NO₂ atmosférico entre la superficie y la tropopausa con una resolución espacial de 3.5 km x 7 km. Esta resolución se mantuvo desde su fecha de lanzamiento en octubre 2017, hasta el 6 de agosto de 2019, fecha en la cual fue corregida a 3.5 x 5.6 km. Las columnas de NO₂ se derivan del espectrómetro UVIS con medidas de radiación solar retrodispersadas en el rango de longitud de onda de 405–465 nm. Para el análisis, se utilizó una variable de garantía de calidad recomendada (qa_value = 0.75) para eliminar los píxeles cubiertos de nubes, las escenas parcialmente cubiertas de nieve/hielo, los errores y las recuperaciones problemáticas (Veeffkind et al., 2012). Para la comparación modelo-satélite se utilizaron archivos correspondientes a 2 órbitas por día en promedio dentro del periodo de simulación. La Figura 4-8 muestra los datos obtenidos de TROPOMI para una de las pasadas del satélite sobre Argentina. Los datos del producto TROPOMI NO₂ nivel 2 (moléculas cm⁻²) fueron remapeados en una proyección cilíndrica con una resolución de 0.1°x0.1° entre las latitudes 20°S - 56°S y las longitudes 52°O - 75°O. Se obtuvo una única salida de matriz 2D georreferenciada promediando todos los conjuntos de datos satelitales. Asimismo, la columna troposférica modelada (utilizando una definición térmica de la tropopausa) se calculó para las simulaciones del modelo WRF-Chem en el dominio más grueso (d01) y se re proyectó en la misma malla cilíndrica Lat/Lon utilizada para el producto TROPOMI NO₂ (ver Capítulos 5 y 6).

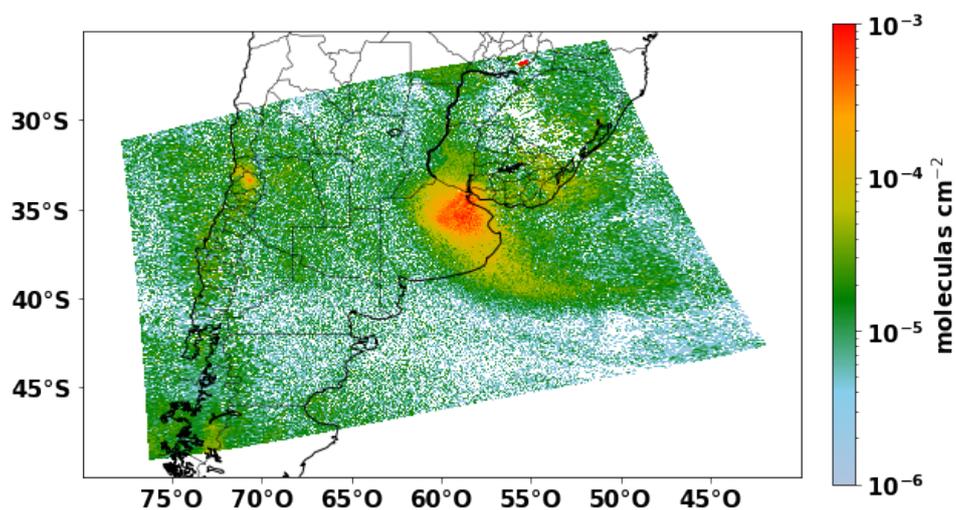


Figura 4-8. Columna troposférica de NO₂, obtenida de con el instrumento TROPOMI para una pasada sobre Argentina para el día 13 de abril de 2020 entre las 17:59 y las 18:04. (Elaboración propia)

4.4 Evaluación de desempeño del modelo

Un modelo de calidad del aire debe demostrar un desempeño aceptable antes de poder ser utilizado en aplicaciones normativas, para garantizar que capta los procesos químicos y físicos importantes de la atmósfera. Para ello, se evalúa la exactitud y la precisión del modelo según determinados criterios. Por ejemplo, los estadísticos sesgo medio (MB, *mean bias*) y sesgo fraccionario medio (MFB, *mean fractional bias*) evalúan la exactitud, pero no la precisión del modelo, mientras que el error fraccionario medio (MFE, *mean fractional error*) incorpora tanto la precisión como la exactitud (Tessum et al., 2015). En particular, las métricas fraccionarias (MFE, MFB) proporcionan una estimación más incesgada, ya que dan el mismo peso a las concentraciones que sobrestiman las observaciones que a las que las subestiman, mientras que otros parámetros estadísticos tienden a resaltar los casos de sobreestimación (Boylan & Russell, 2006).

El desempeño del modelo se evaluó calculando los siguientes estadísticos: sesgo medio (MB), sesgo fraccionario medio (MFB), error fraccionario medio (MFE), sesgo medio normalizado (NMB, *normalized mean bias*) y coeficiente de correlación de Pearson (r, *Pearson correlation coefficient*). Estos parámetros se seleccionaron en base a EPA (1991), Boylan & Russell (2006) y Tessum et al. (2015), y se definen en las ecuaciones presentadas en la Tabla 4-3.

Tabla 4-3. Expresiones matemáticas y rangos para los diferentes parámetros estadísticos

Estadístico	Expresión matemática	Rango
Sesgo medio	$MB = 1/N \sum_{i=1}^N (S_i - O_i)$	-0 a +∞
Sesgo medio normalizado	$NMB = \frac{\sum_{i=1}^N S_i - O_i}{\sum_{i=1}^N O_i}$	-1 a +∞
Sesgo fraccionario medio:	$MFB = 1/N \sum_{i=1}^N \frac{(S_i - O_i)}{(S_i + O_i)/2}$	-200% a +200%
Error fraccionario medio	$MFE = 1/N \sum_{i=1}^N \frac{ S_i - O_i }{(S_i + O_i)/2}$	0% a +200%
Coficiente de correlación de Pearson	$r = \frac{\sum_{i=1}^N (S_i - \bar{S})(O_i - \bar{O})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (S_i - \bar{S})^2 \sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}}$	-1 a +1

Donde, para cualquier variable dada, se toman N pares de valores O_i y S_i , donde O_i se refiere a los datos reales observados y S_i a los datos pronosticados o simulados.

Los criterios de desempeño de los modelos para el O₃ fueron publicados por primera vez en la EPA (1991), donde se ha definido un valor de MFB $\leq \pm 30\%$ y MFE $\leq 45\%$, y se siguen utilizando hasta la fecha. Por otro lado, Boylan & Russell, (2006) han resaltado la falta de este mismo tipo de criterios para otras especies y por tanto a partir de su trabajo han sugerido valores de MFB $\leq \pm 60\%$ y MFE $\leq 75\%$ como criterios de rendimiento para el PM.

Además de los criterios de desempeño previamente mencionados, se utilizó un análisis de varianza (ANOVA) con un valor $p < 0.01$ y un valor alfa de 0.05 como medida estadística para evaluar las diferencias entre simulaciones (ver Capítulo 5).

5 Influencia del inventario de emisiones en la distribución espacio-temporal de los contaminantes atmosféricos modelados en Buenos Aires, Argentina, utilizando WRF-Chem

Nota: Los resultados de este capítulo fueron publicados en el siguiente artículo y su correspondiente material suplementario.

López-Noreña, A. I., Berná, L., Tames, M. F., Millán, E. N., Puliafito, S. E., & Fernandez, R. P. (2022). Influence of emission inventory resolution on the modeled spatio-temporal distribution of air pollutants in Buenos Aires, Argentina, using WRF-Chem. *Atmospheric Environment*, 269, 118839. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2021.118839>

5.1 Introducción

En la actualidad, más de la mitad de la población mundial vive en ciudades urbanas y se espera que estos valores aumenten en las próximas décadas (ONU, 2014). Dada la gran densidad de población y el tráfico vehicular, las personas que viven en las megaciudades están más expuestas a contaminantes potencialmente peligrosos para la salud (Vasconcellos et al., 2011). En particular, la Ciudad Autónoma de Buenos Aires (CABA) es la ciudad más poblada de Argentina y, al incluir la Región Metropolitana que la rodea (AMBA), es la segunda megaciudad más grande del hemisferio sur. Para monitorear la calidad del aire en CABA, la Agencia de Control Ambiental local tiene actualmente tres estaciones de monitoreo continuo dentro del centro de la ciudad (Pineda Rojas et al., 2020) (ver Capítulo 4). La ausencia de una red de monitoreo más extensa y permanente hace muy difícil estimar adecuadamente la variación espacial de los contaminantes en toda el área urbana y suburbana considerando la amplia superficie de la ciudad (Venegas & Mazzeo, 2010).

En CABA, los estudios de calidad del aire urbano comenzaron a finales de los años 90 y se centraron en la evaluación de las mediciones de contaminantes criterio (es decir, CO, NO₂, PM₁₀) frente a los umbrales regulatorios locales e internacionales, así como en determinar el tamaño y la densidad de una red de calidad del aire adecuada para el monitoreo de esta ciudad (Bogo, 1999; Bogo et al., 2003; Venegas & Mazzeo, 2006, 2010). De hecho, Mazzeo & Venegas (2008) han sugerido un mínimo de 6 estaciones de monitoreo para abordar adecuadamente la distribución espacial de las fuentes contaminantes dentro de CABA, lo cual no se ha logrado hasta el momento. Más recientemente, Pineda

Rojas et al. (2020) analizaron registros de las concentraciones de CO, NO₂ y PM₁₀ para un periodo de ocho años en CABA, asociando estos resultados a variables meteorológicas superficiales relevantes mediante una combinación de técnicas estadísticas y de Inteligencia artificial.

El modelo WRF-Chem se ha aplicado en todo el mundo ya que permite utilizar una amplia gama de parametrizaciones químicas y físicas, optimizadas para las configuraciones del modelo en dominios específicos a escala regional (incluyendo inventarios de emisiones regionales) (Grell et al., 2005). Específicamente, para América Latina, González et al. (2018) demostraron que el modelado de O₃ y PM₁₀ mejoran significativamente cuando se consideran los inventarios de emisiones regionales. Ying et al. (2009) analizaron la sensibilidad de las concentraciones de O₃ a las variaciones diurnas dentro de México D.F., sugiriendo que los cambios y/o desfases en los picos de emisión mejoran la calidad del aire modelada incluso si las emisiones totales permanecen sin cambios. Del mismo modo, Hoshyaripour et al. (2016) demostraron que el modelo WRF-Chem predice con éxito las concentraciones de CO, O₃ y NO_x derivadas desde satélite en São-Paulo.

A pesar de los numerosos estudios existentes sobre la calidad del aire a escala urbana, aun se carece de investigaciones a escala regional y sub-regional utilizando modelos regionales con información de entrada en alta resolución espacial desarrollada específicamente para Argentina. Este enfoque permite incorporar en la simulación las diversas características de la región con el objetivo de abordar de manera más integral la contaminación atmosférica en Buenos Aires y sus alrededores (AMBA). En este capítulo se utiliza el modelo WRF-Chem en resolución fina con una configuración regional optimizada. Dicha configuración integra distintos conjuntos de datos regionales y de alta resolución (emisiones antropogénicas y mapas LULC) para simular la calidad del aire en el AMBA, considerando 3 dominios anidados con un tamaño de grilla horizontal de 20 x 20 km, 4 x 4 km y 1.3 x 1.3 km y el mecanismo químico MOZART-GOCART. El desempeño del modelo obtenido con dos inventarios de emisiones conceptualmente diferentes para Argentina -a saber, el inventario nacional GEAA-AEI para Argentina (Puliafito et al., 2021) y el inventario global EDGAR-HTAP (Janssens-Maenhout et al., 2015)(ver Capítulo 3)- es validado contra las mediciones de calidad del aire existentes y las observaciones derivadas de satélites durante el otoño austral de 2018 (ver Capítulo 4). En este capítulo se presenta una completa comparación entre la distribución espacial y temporal de los contaminantes atmosféricos simulados, con un enfoque especial en la determinación de las ubicaciones más adecuadas para futuras estaciones de calidad del aire destinadas a abordar el tamaño y la forma de la pluma principal de contaminantes sobre Buenos Aires.

5.2 Metodología

5.2.1 Área de estudio y dominios de simulación

CABA es la capital de la República Argentina. Está situada en la región centro-oriental del país, en la ribera suroeste del Río de la Plata, a 34° 36' de latitud S y 58° 26' de longitud O, dentro de la región biogeográfica pampeana. La altitud media de la ciudad es de ~20 m sobre el nivel del mar. Según la información facilitada por el Servicio Meteorológico Nacional de Argentina (SMN), el clima de Buenos Aires es templado, con una temperatura media anual de 17.9°C y una humedad relativa media del 71.4%. La precipitación media anual alcanza los 1236.3 mm anuales, con lluvias más frecuentes durante el verano. La ciudad está influenciada principalmente por dos tipos de vientos zonales: el Pampero, que sopla desde el SO continental y se caracteriza por un aire seco, frío y contaminado; y la Sudestada, procedente de la ribera del SE y del Océano Atlántico, cargada de aire limpio y húmedo. Un área urbana y suburbana continua que se extiende fuera de los límites de CABA hacia el Sur, el Norte y el Oeste en la Provincia de Buenos Aires conforma la megaciudad del AMBA (~15 millones de habitantes). En esta zona se concentra aproximadamente un tercio de la población del país (INDEC, 2016). La alta densidad poblacional genera una significativa concentración de automóviles, transporte público y tráfico de camiones. Además, el AMBA alberga grandes zonas industriales y centrales eléctricas en las inmediaciones del centro de la ciudad (Venegas & Mazzeo, 2010).

En este capítulo realizaron tres simulaciones diferentes con el modelo WRF-Chem para el periodo comprendido entre el 17 de mayo y el 8 de junio de 2018. Sin embargo, el periodo de tiempo considerado para la validación del modelo comienza el 20 de mayo, ya que tras múltiples pruebas de sensibilidad con diferentes periodos de estabilización (*spin-up*), se comprobó que las concentraciones modeladas en el dominio más interno se estabilizaron luego de 72h (del 17 al 19 de mayo). Cabe aclarar que para las regiones rurales y suburbanas el acoplamiento atmósfera-superficie podría requerir un periodo de tiempo más prolongado para alcanzar la estabilización (Sicard et al., 2021; Tuccella et al., 2012).

Se consideraron tres dominios anidados, como se muestra en la Figura 5-1. El dominio 1 (d01) cubre toda Argentina, parte de sus países fronterizos (Brasil, Bolivia, Chile, Paraguay y Uruguay), así como porciones de los océanos Atlántico y Pacífico con una resolución de 20 km x 20 km. El dominio 2 (d02; Figura 5-1b) cubre el noroeste de la provincia de Buenos Aires, incluyendo las zonas agrícolas, y parte del Río de la Plata, con una resolución de 4 km x 4 km. El dominio 3 (d03; Figura 5-1c y Figura 5-1d) se centra en CABA y la mayor parte del área del AMBA, con una resolución de 1.3 km x 1.3 km. La configuración del modelo incluye una estructura vertical de 55 capas (que se expanden hasta ~20 km y con 10 capas por debajo de los 2 km).

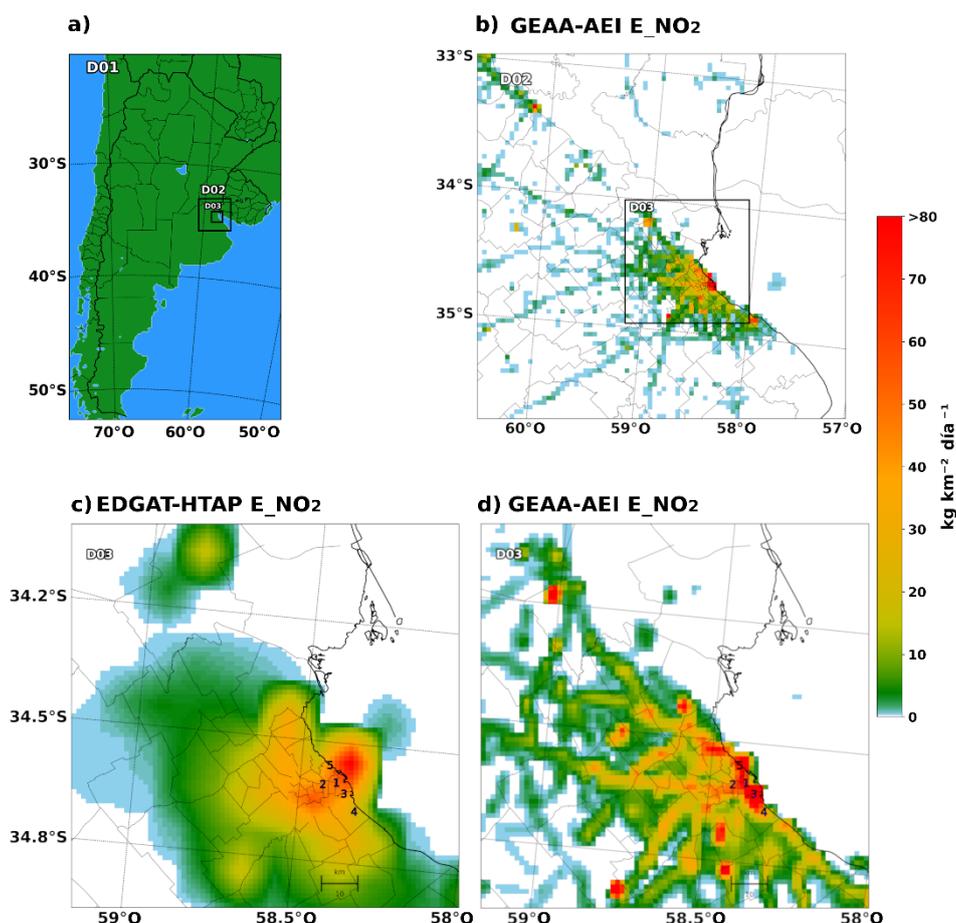


Figura 5-1. a) Dominios del modelo WRF-Chem (d01, d02 y d03). Emisiones antropogénicas de NO_2 (E_{NO_2} , $\text{kg km}^{-2} \text{ día}^{-1}$) para b) d02 de GEAA-AEI, c) d03 de EDGAR-HTAP y d) d03 de GEAA-AEI. Los números 1 a 4 representan la ubicación de las estaciones de calidad del aire: Sitios de monitoreo CBC (1, 2 y 3) en los que solo se miden NO_2 y PM_{10} , y el sitio EMC-I (4) que mide NO_2 , PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$, O_3 y meteorología. El número 5 muestra la estación meteorológica del aeropuerto local Jorge Newbery (ver Sección 4.2). (Elaboración propia)

5.2.2 Configuración del modelo

Los detalles de la metodología y la configuración del modelo para las simulaciones presentadas en este capítulo se tratan en los Capítulos 2 y 3, sin embargo, algunos de los aspectos principales se describen a continuación y se presentan de manera resumida en la Tabla 5-1. Las simulaciones se realizaron utilizando el sistema de modelado completo WRF-Chem-KPP tal cual se describe en el Capítulo 2. Las IC/BC meteorológicas se tomaron de la base de datos GDAS/FNL, con una resolución horizontal de $0.25^\circ \times 0.25^\circ$ y resolución temporal de 6 horas (ver Sección 2.1.2). Las IC/BC químicas para gases y aerosoles se extrajeron utilizando como entrada simulaciones globales realizadas con el modelo CAM-Chem (ver Sección 2.4). La configuración química incluye el esquema de fase gaseosa MOZART (Emmons et al., 2010), el esquema de aerosoles GOCART (Chin et al., 2000), y el cálculo de tasas de fotólisis basado en el esquema Fast-J (Fast et al., 2006). Los factores de especiación de NMVOCs, utilizados se describen en la Sección 2.3.4.1. Las emisiones por quema de biomasa para el año 2018 fueron obtenidas a partir

de la base de datos de incendios FINN (Wiedinmyer et al., 2011) (ver Sección 3.3). Además, se utilizó la configuración regional optimizada de WPS para Argentina (Sección 2.1.3), que incluye mapas en alta resolución para mejorar la representación de los campos de elevación del terreno y LULC (Cremades, 2017; Fernandez et al., 2010; Mulena et al., 2016; Puliafito et al., 2015). Finalmente, dado que la resolución más fina en el dominio d03 es superior a 1 km, la configuración actual no incluye ninguna parametrización de dosel urbano.

Tabla 5-1. Resumen de la configuración de WRF-Chem

Parametrizaciones Físicas y Químicas de WRF-Chem	Esquema Utilizado
Elevación del terreno	SRTM3 (Rodríguez et al., 2005)
LULC	USGS/GEAA (Puliafito, et al., 2015)
Parametrización de microfísica de nubes	Eta (Ferrier, 1994)
Parametrización de radiación	RRTM (Mlawer et al., 1997)
Parametrización de superficie	Noah Land Surface Model (Chen & Dudhia, 2001)
Parametrización de PBL	YSU (Hong & Lim, 2006)
Parametrización de cúmulos	Grell 3D (Grell & Dévényi, 2002)
Mecanismo de fase gaseosa	MOZART – KPP (Emmons et al., 2010)
Esquema de aerosoles	GOCART (Chin et al., 2000)
Inventario global de emisiones antropogénicas	EDGAR-HTAP 2010 (Janssens-Maenhout et al., 2015)
Inventario regional de emisiones antropogénicas	GEAA-AEI 2021 (Puliafito et al., 2021)
Especiación de NMVOCs	Siguiendo a Emmons et al. (2010) y Lopez-Noreña et al. (2019)
Deposición seca	Acoplada al suelo y la vegetación (Wesely, 1989)
Emisiones por quema de biomasa	FINN (Wiedinmyer et al., 2011)
IC/BC meteorológicas	NCEP-FNL 0.25 ° (NCEP, 2015)
IC/BC químicas	CAM-Chem (Fernandez et al., 2017)
Resolución horizontal de los dominios	20Km (d01), 4km (d02), 1.3km (d03)
Esquema de fotólisis	Fast-J (Fast et al., 2006)

5.2.3 Inventarios de emisión y casos de simulación de WRF-Chem

En este capítulo se utilizaron dos inventarios de emisiones antropogénicas: la base de datos global EDGAR-HTAP y el inventario argentino de alta resolución GEAA-AEI. Las principales características y diferencias entre estos dos inventarios de emisiones fueron descritas previamente en el Capítulo 3 (Sección 3.2). Una descripción más detallada de dichas bases de datos puede encontrarse en Janssens-Maenhout et al. (2015) y Puliafito et al. (2021), respectivamente. La generación de los archivos de entrada de las emisiones antropogénicas de WRF-Chem se realizó utilizando la herramienta anthro emis merge (ver Sección 3.1.3.3). La herramienta fue previamente adaptada para fusionar archivos de entrada de varias bases de datos simultáneamente, permitiendo al usuario realizar un redimensionamiento espacial y temporal en los inventarios de emisiones que incluyen perfiles temporales estacionales, diarios y horarios para las diferentes fuentes de emisión.

Con el fin de evaluar la influencia del inventario de emisiones en la distribución espacio-temporal de los contaminantes atmosféricos modelados, se llevaron a cabo diversos casos de simulación. Inicialmente se realizó una simulación base de WRF-Chem utilizando el inventario global de emisiones EDGAR-HTAP (EDGARnp, donde np significa sin perfil temporal) y se comparó con una segunda simulación basada en el inventario GEAA-AEI. Como GEAA-AEI no considera las emisiones fuera del territorio argentino, para las zonas fuera de la frontera del país, en el dominio más externo (d01), se utilizó la base de datos EDGAR-HTAP. En adelante se denominará GEAAnp a la simulación realizada con esta combinación de inventarios. Nótese que no se aplicó ninguna variación diurna a las emisiones de EDGARnp ni de GEAAnp. Adicionalmente, investigaciones previas (Tie et al., 2007; Ying et al., 2009) (Ying et al., Tie et al.) han señalado que no solo la cantidad de emisiones ejerce una influencia significativa en las concentraciones simuladas y en la formación de compuestos como el O₃, sino también el momento en el que se emiten diversas especies, el cual se caracteriza por variaciones diurnas. Este factor desempeña un papel crucial en la determinación de los niveles máximos y mínimos diarios de concentración, así como en sus fluctuaciones diurnas. En consecuencia, se optó por llevar a cabo una tercera simulación, en la cual se aplicó un perfil temporal diurno a las emisiones de GEAA-AEI (GEAAprf, donde prf indica perfil temporal) basado en la variación horaria de las actividades de emisión, y la categoría de uso del suelo rural o urbano, de cada punto de la cuadrícula del modelo (ver Sección 3.1.3.3). El perfil temporal utilizado se muestra en la Figura 3-7. Por último, las fuentes puntuales, como las emisiones de las centrales eléctricas y las chimeneas, requieren una alta resolución espacial y la modelación del ascenso de la pluma (Crippa et al., 2018) para poder ser correctamente representadas en el modelo. Sin embargo, como el conjunto de datos EDGAR-HTAP solo proporciona emisiones de diferentes sectores y actividades a nivel de superficie (Janssens-Maenhout et al., 2015), dentro de GEAA-AEI se distribuyó la emisión total de las fuentes puntuales sobre la superficie de la cuadrícula del modelo que contiene cada fuente.

Las emisiones antropogénicas diarias superficiales utilizadas para las diferentes simulaciones dentro de d01, d02 y d03 se presentan en la Tabla 5-2. Nótese que las emisiones totales de EDGARnp dentro del territorio argentino (dominio d01) son menores que las de GEAAnp, con diferencias totales que alcanzan -30% y -33% para NO₂ y PM₁₀, respectivamente. Sin embargo, las emisiones totales dentro del dominio más interno (d03) centrado en el AMBA son ~4% (NO₂) y casi 250% (PM₁₀) mayores para EDGAR-HTAP. Aunque la distribución espacial observada en ambos inventarios muestra patrones similares y se maximiza dentro de los grandes centros urbanos y las megaciudades, las estimaciones de las emisiones de GEAA-AEI en áreas remotas permiten distinguir las emisiones vehiculares provenientes de autopistas y rutas troncales (ver Figura 5-1d y Figura 3-2 (b y d)). En cambio, el inventario EDGAR-HTAP (basado en los valores totales notificados por las provincias) presenta una distribución media y homogénea para las mismas zonas (ver Figura 5-1c y Figura 3-2 (a y c)). Las diferentes distribuciones en espacio e intensidad (p. ej. emisiones máximas vs. mínimas) entre los inventarios EDGAR-HTAP y GEAA-

AEI dentro de las áreas suburbanas y rurales de Argentina han sido previamente reportadas (Puliafito et al., 2015; Schiavone, 2018), pero el impacto de considerar estas emisiones diferenciadas en la calidad del aire dentro de los modelos regionales no ha sido evaluado hasta el momento.

Tabla 5-2. Emisiones antropogénicas diarias para contaminantes atmosféricos primarios en los tres dominios considerados ^a

Especie		d01 (20 km)		d02 (4 km)		d03 (1.3km)	
		EDGAR	GEAA	EDGAR	GEAA	EDGAR	GEAA
NO ₂	Max.	29.3	22.5	72.3	119.2	81.1	346.6
	Total	188.3	268.8	73.7	78.4	55.0	53.0
PM ₁₀	Max.	32306.5	16217.4	54956.7	80356.0	59536.8	87729.2
	Total	200.4	298.3	72.0	49.3	52.6	15.3
PM _{2.5}	Max.	14828.2	8795.7	25309.7	51988.4	27338.9	52831.6
	Total	106.8	185.6	36.3	30.9	25.7	11.6
CO	Max.	2144.9	504.6	4592.4	2084.9	4050.2	3723.2
	Total	9258.2	6242.8	4449.8	1564.9	2960.7	1111.5
SO ₂	Max.	559.6	244.7	2073.1	4349.6	2323.4	719.1
	Total	808.3	191.9	346.7	134.7	285.3	17.5
NO	Max.	171.8	132.2	424.6	699.9	475.8	2034.6
	Total	1105.2	1578.1	432.9	460.6	322.6	311.1
NH ₃	Max.	7.3	25.4	12.4	67.2	13.4	113.1
	Total	1338.7	1983.4	110.6	181.1	17.7	25.4

^a Los valores máximos (Max) se expresan en $\text{kg km}^{-2} \text{ día}^{-1}$ para NO₂, CO, SO₂, NO y NH₃ y se expresan en $\mu\text{g m}^{-2} \text{ día}^{-1}$ para PM₁₀ y PM_{2.5}. Los valores totales (Total) se reportan en Ton día^{-1} y para el caso del d01 fueron calculados únicamente dentro del territorio argentino (Área superficial: 2.8 millones de km^2).

5.2.4 Metodología para la evaluación del rendimiento del modelo

De acuerdo con EPA (1991), la evaluación del rendimiento del modelo debe llevarse a cabo utilizando tanto métodos gráficos como estadísticos. La evaluación del rendimiento meteorológico del modelo se proporciona en la Sección 5.3.1, los resultados de la calidad del aire se analizan en las Secciones 5.3.2 y 5.3.3. Finalmente, en la Sección 5.3.4 realizamos un análisis de correlación y ANOVA elemento por elemento para evaluar la distribución espacial de las columnas troposféricas de NO₂ modeladas con respecto a los datos satelitales TROPOMI regrillados.

Para evaluar las concentraciones superficiales de NO₂, PM₁₀, PM_{2.5} y O₃ en el dominio interior (d03) se aplicaron criterios gráficos, utilizando comparaciones temporales como el ciclo diurno promedio (Figura 5-3), la estimación de la distribución de densidad de frecuencias (Figura 5-4) y las series temporales horarias (Figura 5-5 y Figura 5-6) para el periodo seleccionado. Cada simulación se comparó en el punto de la cuadrícula más cercano a las coordenadas geográficas de la estación de monitoreo. Además, se utilizaron mapas para comparar la distribución media de las concentraciones superficiales simuladas entre los diversos escenarios de simulación. Asimismo, se utilizaron mapas para llevar a cabo la comparación entre la columna de NO₂ simulada y la columna correspondiente proporcionada por el

producto satelital. Por otra parte, la evaluación estadística de los resultados de la simulación meteorológica y de la calidad del aire se realizó con las siguientes métricas: r, MB, MFB y MFE. Dichas métricas y sus respectivos valores de referencia se definieron previamente en la Sección 4.4.

5.3 Resultados y discusión

5.3.1 Evaluación meteorológica

La temperatura media horaria (T), la velocidad del viento (VV) y la humedad relativa (HR) superficiales obtenidas a partir de todas las simulaciones con WRF-Chem se compararon con las observaciones en superficie en AEP y EMC-I. En la Tabla 5-3 se recopilan los resultados estadísticos promedio de r y MB. WRF-Chem mostró una buena capacidad para reproducir la T y la HR para todas las estaciones en comparación con las observaciones ($r > 0.6$). Las T y HR simuladas coincidieron mejor con las observaciones en AEP, presentando un coeficiente de correlación medio $r > 0.7$, mientras que la estación EMC-I presentó los valores de error más bajos para VV. Las diferencias meteorológicas entre EDGARnp, GEAAnp y GEAAprf, no fueron significativas. La Tabla 5-3 sugiere que el modelo en todas las estaciones de medición subestimó ligeramente los valores observados para T y HR, mientras que el desempeño de la VV simulada depende de la estación considerada (ver Figura 5-2).

Tabla 5-3. Resultados estadísticos de las variables meteorológicas simuladas para el dominio d03^a

Estación	Variable	Promedio Observado	Promedio Modelado	r	MB
EMC-I	T	13.3	12.4	0.8	-0.9
	HR	77.9	72.1	0.6	-5.7
	VV	11.9	12.3	0.6	0.4
AEP	T	13.6	12.5	0.9	-1.1
	HR	71.7	71.8	0.7	0.1
	VV	10.0	12.9	0.4	2.8

^a La temperatura (T), la humedad relativa (HR) y la velocidad del viento (VV) se expresan en °C, % y km h⁻¹ respectivamente. El MB tiene las mismas unidades que su correspondiente variable meteorológica

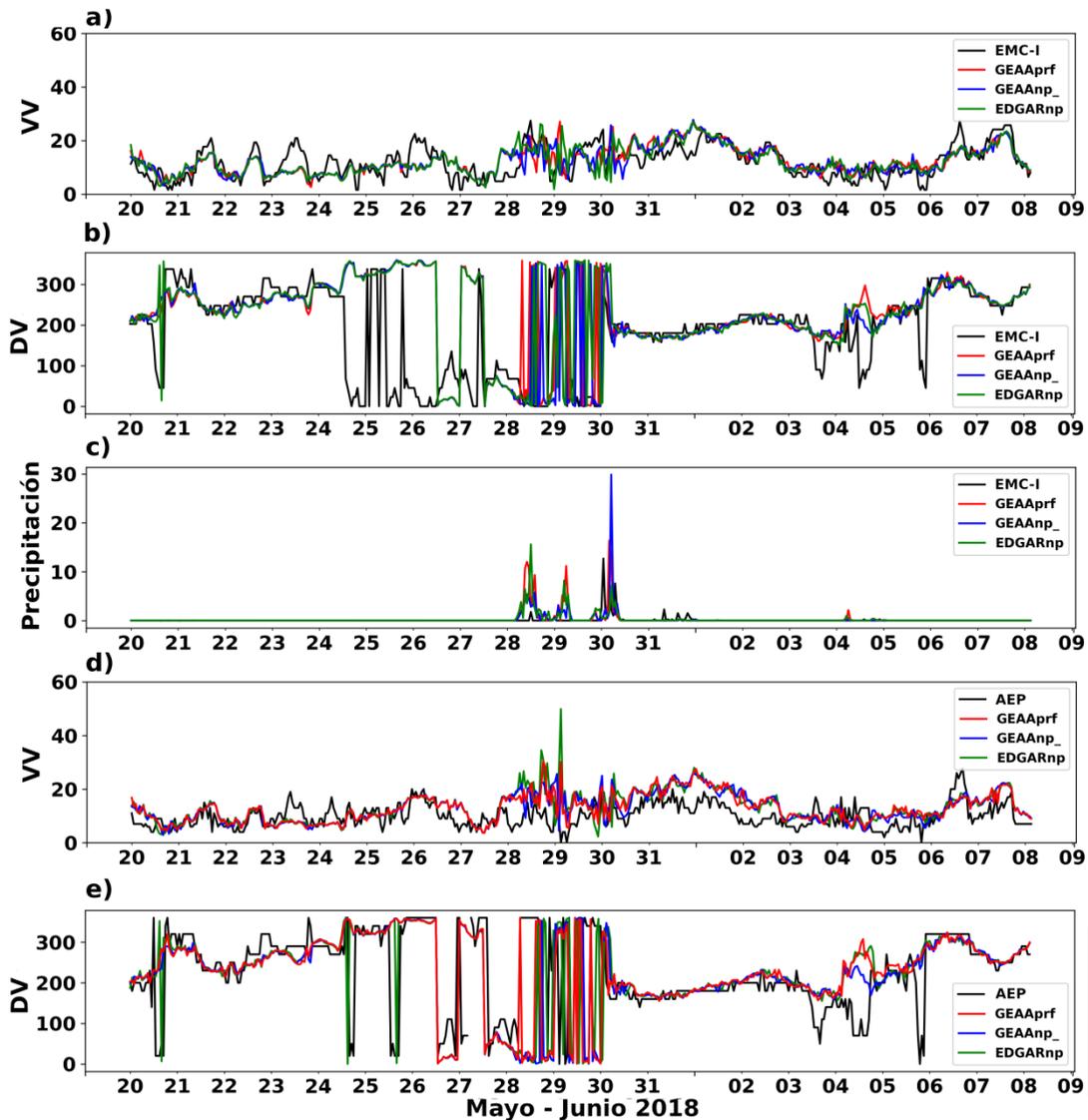


Figura 5-2. Series de tiempo horarias de la velocidad del viento en superficie (VV, km h^{-1}), la dirección del viento (DV, $^{\circ}$) y la precipitación (mm h^{-1}) en cada sitio de monitoreo: a) VV, b) DV, c) precipitación en EMC-I, d) VV y e) DV en AEP, para las observaciones (negro) y todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). (Elaboración propia)

5.3.2 Variación temporal de los contaminantes y evaluación de la calidad del aire modelada

En esta sección, la variabilidad temporal de las concentraciones simuladas de PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$, NO_2 y O_3 se comparó con las observaciones en superficie. Los estadísticos descriptivos y de rendimiento, calculados sobre una base horaria, se resumen en la Tabla 5-4. El ciclo diurno promedio para todas las especies se resume en la Figura 5-3, las distribuciones de densidad de frecuencia se muestran en la Figura 5-4, y las series de tiempo completas para cada estación se muestran en la Figura 5-5 y Figura 5-6. Una descripción detallada de cada especie se discute en las siguientes subsecciones.

Tabla 5-4. Comparación estadística de las series de tiempo horarias de PM₁₀, PM_{2.5}, O₃ y NO₂ simuladas en superficie y observadas para el periodo de simulación ^a

	Estación	Observación Prom. (std)	Simulación	Modelación Prom. (std)	r	MB	MFB	MFE
NO ₂	EMC-I	35.9 (18.5)	GEAAprf	43.5 (25.7)	0.423	7.6	16.2	53.8
			GEAAnp	48.2 (23.3)	0.509	12.4	33.0	46.0
			EDGARnp	48.2 (20.8)	0.489	12.4	34.7	45.5
	CBC	40.0 (14.3)	GEAAprf	47.3 (14.5)	0.335	7.3	17.3	34.7
			GEAAnp	54.8 (16.6)	0.302	14.8	31.6	38.9
			EDGARnp	52.0 (17.1)	0.378	12.0	25.6	36.8
PM ₁₀	EMC-I	17.4 (10.2)	GEAAprf	15.0 (7.7)	0.005	-2.5	-7.7	58.3
			GEAAnp	17.6 (9.7)	0.006	0.1	4.7	57.7
			EDGARnp	30.5 (15.5)	0.231	13.0	52.7	68.3
	CBC	30.3 (13.8)	GEAAprf	14.5 (6.8)	-0.055	-15.8	-54.0	72.7
			GEAAnp	18.0 (8.4)	-0.049	-12.4	-46.1	61.7
			EDGARnp	30.5 (14.7)	-0.069	0.1	-0.9	53.5
PM _{2.5}	EMC-I	12.0 (7.3)	GEAAprf	8.0 (4.0)	0.044	-3.9	-29.3	63.2
			GEAAnp	9.6 (5.2)	0.059	-2.4	-15.1	59.2
			EDGARnp	15.2 (7.6)	0.301	3.2	26.4	55.6
O ₃	EMC-I	14.0 (10.4)	GEAAprf	15.2 (16.6)	0.479	1.3	-42.1	106.1
			GEAAnp	12.0 (13.9)	0.580	-1.9	-65.2	107.6
			EDGARnp	11.6 (13.4)	0.520	-2.3	-70.4	112.8

^a Promedio (Prom.) y desviación estándar (std) de NO₂, PM₁₀, PM_{2.5} y O₃ se expresan en µg m⁻³. El MB tiene las mismas unidades que su especie correspondiente. El MFB y MFE se expresan en porcentaje (%). El r es una variable adimensional.

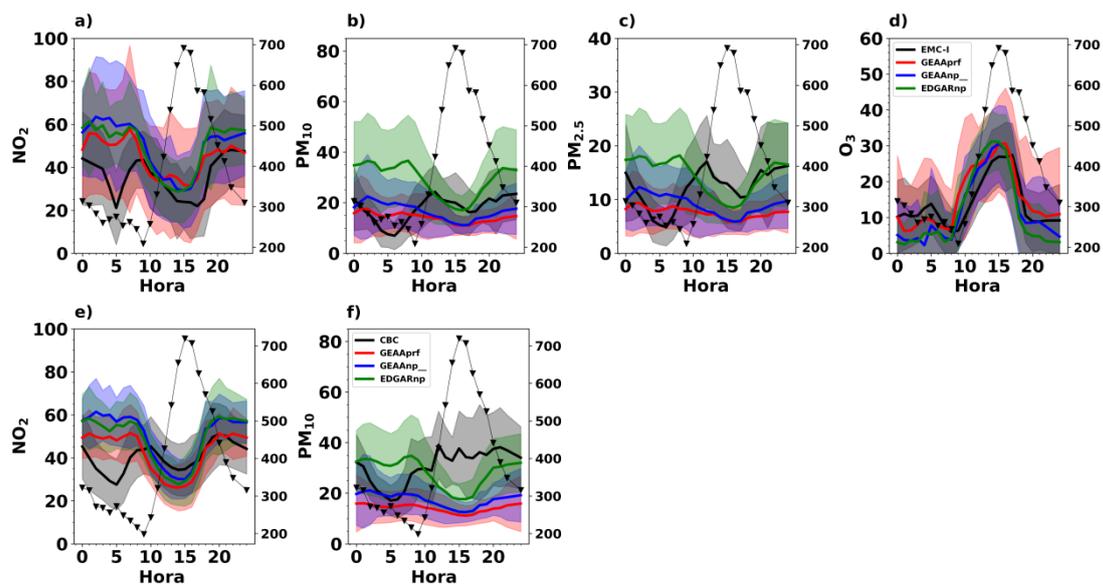


Figura 5-3. Ciclos diarios promedio en cada sitio de medición para las concentraciones superficiales de: a) NO_2 , b) PM_{10} , c) $\text{PM}_{2.5}$ y d) O_3 en EMC-I, y e) NO_2 , f) PM_{10} en CBC (eje izquierdo, $\mu\text{g m}^{-3}$), para todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). Las observaciones se muestran en línea negra y las áreas sombreadas representan la variabilidad de la serie temporal, definida como 1 desviación estándar. La línea negra con triángulos hacia abajo indica la altura de la PBL simulada (eje derecho) en metros (m). (Elaboración propia)

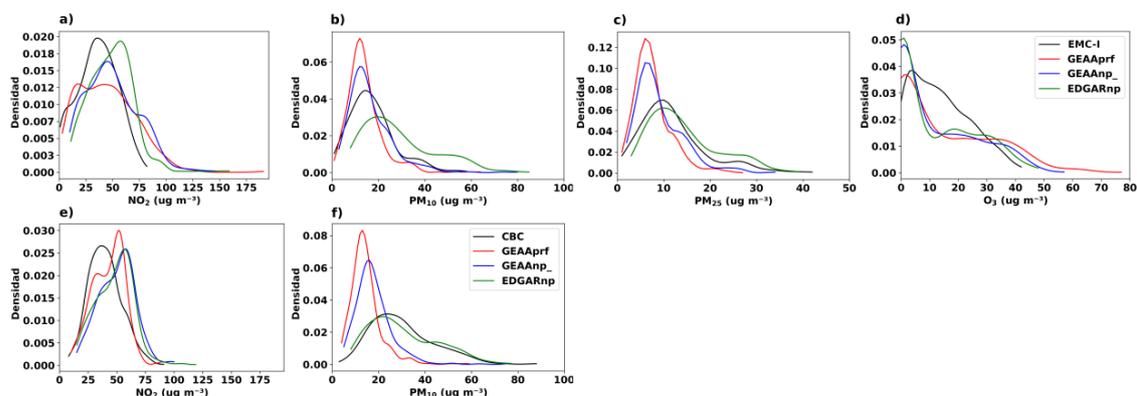


Figura 5-4. Distribución de la densidad de frecuencias en cada sitio de medición para a) NO_2 , b) PM_{10} , c) $\text{PM}_{2.5}$ y d) O_3 en EMC-I, y e) NO_2 , f) PM_{10} en CBC, para todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). Las observaciones se muestran en línea negra. La estimación de la densidad se realizó asumiendo en una distribución de frecuencias gaussianas. (Elaboración propia)

5.3.2.1 Dióxido de nitrógeno (NO_2) y Ozono (O_3)

Las concentraciones medias observadas de NO_2 para las estaciones CBC y EMC-I mostraron valores en el rango de 35 a 40 $\mu\text{g m}^{-3}$ (ver Tabla 5-4), con valores máximos durante la noche y concentraciones mínimas de NO_2 durante el día (ver Figura 5-3a y e). En todas las simulaciones de WRF-Chem se observó el mismo ciclo diurno bimodal que en las observaciones y se reprodujo correctamente el mínimo diurno de NO_2 (entre las 10:00 y las 17:00 horas, Hora Local). Por el contrario, la reducción nocturna de NO_2

de los datos observados no fue captada por el modelo, aunque se consiguió una reducción significativa de la sobreestimación cuando se consideró el perfil temporal horario (GEAAprf). Este hecho se explica por las menores emisiones nocturnas de NO_x en el caso GEAAprf, que disminuyen la acumulación de NO₂ sobreestimado por el modelo antes de la puesta del Sol. La discrepancia entre las simulaciones y las observaciones revela una menor capacidad del modelo para representar los valores nocturnos cuando no se considera el perfil temporal de las emisiones.

Al cambiar los inventarios de emisiones en WRF-Chem se introdujeron diferencias notables en la distribución de la densidad de frecuencia de NO₂ modelada, sobre todo para los valores intermedios más frecuentemente observados (ver Figura 5-4 a y e). En EMC-I, GEAAprf presentó distribuciones máximas que se acercan más a las observaciones, mientras que EDGARnp presentó una frecuencia máxima $> 60 \mu\text{g m}^{-3}$ que casi duplica el máximo observado (Figura 5-4a). En CBC, tanto EDGARnp como GEAAprf presentaron una distribución centrada en aprox. $60 \mu\text{g m}^{-3}$, mientras que la densidad máxima observada se situó en torno a los $30 \mu\text{g m}^{-3}$ (Figura 5-4e). La inclusión del perfil horario (GEAAprf) desplazó la distribución de frecuencias hacia concentraciones más bajas, aunque la distribución observada de NO₂ no fue captada completamente por ninguna de las simulaciones. Las Figura 5-5a y b muestran las concentraciones horarias de NO₂ simuladas en superficie, que de forma general concuerdan con las observaciones, especialmente durante la primera y la última semana del periodo de simulación. Sin embargo, se pueden encontrar algunas discrepancias durante los días 28 a 30 de mayo, cuando todas las simulaciones de WRF-Chem presentaron inestabilidades numéricas que provocaron cambios bruscos en la velocidad y dirección del viento que llegaba del Norte (ver Figura 5-2) y generaron las máximas concentraciones horarias simuladas de toda la serie temporal. Los coeficientes de correlación fueron similares para todos los casos de simulación ($r \approx 0.4-0.5$ para EMC-I fue ligeramente mayor que para CBC, $r \approx 0.3$). El sesgo medio del modelo fue siempre positivo y osciló entre MB ≈ 7.3 y $14.8 \mu\text{g m}^{-3}$ (MFB ≈ 16.2 y 34.7%), pero disminuyó en ambas estaciones cuando se utilizó GEAAprf (ver Tabla 5-5 y la discusión a continuación).

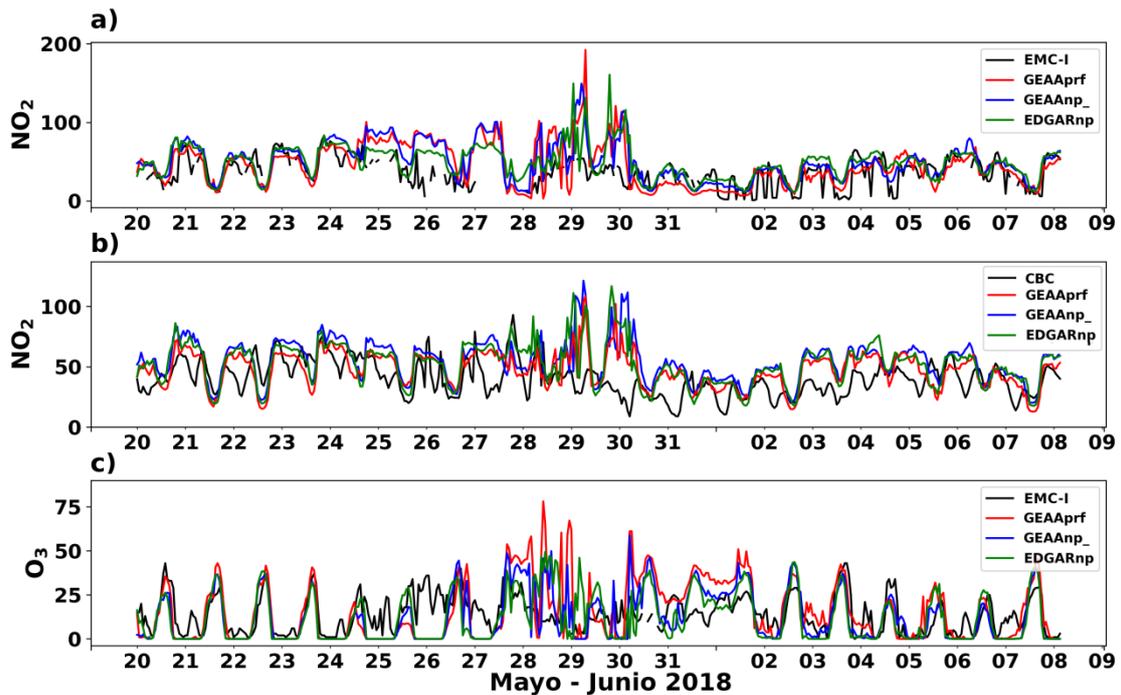


Figura 5-5. Series temporales horarias de los contaminantes superficiales en fase gaseosa ($\mu\text{g m}^{-3}$) en cada sitio de medición: a) NO_2 en EMC-I, b) NO_2 en CBC y c) O_3 en EMC-I, para las observaciones (negro) y todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). (Elaboración propia)

La evaluación del O_3 simulado se limitó a la comparación con la estación de calidad del aire EMC-I debido a la poca disponibilidad de datos. En general, el modelo presentó una buena reproducción del ciclo diurno del O_3 , especialmente durante el día y el anochecer (Figura 5-3d y Figura 5-5c). Nótese que los valores medios nocturnos de O_3 fueron subestimados, dando lugar a una mayor frecuencia modelada de niveles bajos de O_3 en todas las simulaciones ($<10 \mu\text{g m}^{-3}$), mientras que la mayor densidad observada se situó entre 10 y $20 \mu\text{g m}^{-3}$. Se observó una clara mejora cuando se consideró el perfil horario de las emisiones de contaminantes primarios: GEAAprf presentó una marcada disminución en la frecuencia de distribución para las concentraciones bajas, pero un aumento en la ocurrencia de valores altos (Figura 5-4d). Esta mejora es atribuible a las menores emisiones de NO_x durante la noche (ver perfil temporal de emisiones en la Figura 3.7), que en consecuencia redujeron la pérdida nocturna del O_3 inducida por el NO_2 (Wang et al., 2006), lo que dio lugar a un menor sesgo modelado ($\text{MB} = 1.3 \mu\text{g m}^{-3}$) para GEAAprf en comparación con GEAAnp ($-1.9 \mu\text{g m}^{-3}$) y EDGARnp ($-2.3 \mu\text{g m}^{-3}$). La sensibilidad del perfil nocturno de O_3 a las variaciones del ciclo diurno de las emisiones de NO_x coincide con estudios anteriores (Wang et al., 2010; Ying et al., 2009).

El ciclo diurno de NO_2 y O_3 en el modelo se vio fuertemente influenciado por la radiación y la evolución cíclica de la PBL. De hecho, la adecuada representación de la PBL en el modelo de calidad del aire puede ser un factor determinante y una posible razón para la sobreestimación de los valores nocturnos (Ying et al., 2009). En particular, los resultados de WRF-Chem mostraron que el mejor desempeño del modelo se logra bajo condiciones de luz solar, cuando la altura de la PBL está bien resuelta (ver la línea negra

con triángulo hacia abajo en la Figura 5-3), mientras que el peor desempeño ocurre durante la noche, cuando la PBL alcanza su mínimo. Estudios anteriores sugieren que las parametrizaciones actuales utilizadas en WRF-Chem para modelar la evolución de la PBL deben mejorarse para reproducir los resultados nocturnos (Kuik et al., 2016). Además, se ha demostrado que el esquema de capa límite YSU utilizado en este estudio produce una PBL menos profunda y más estable por la noche, lo que conduce a una mayor acumulación de NO_x (Hoshyaripour et al., 2016). Por lo tanto, un desarrollo nocturno poco profundo de la PBL, así como la menor eficiencia de la deposición seca de óxidos de nitrógeno en la superficie del modelo (que a su vez depende de los campos LULC), son las causas más probables de la sobreestimación nocturna de NO₂ y la subestimación de O₃ en CABA. Lamentablemente, no se dispone de datos de radiosondeo para comparar con la altura de la PBL simulada durante la noche. Otra posible causa de los altos niveles nocturnos de NO₂ simulados podría ser que los procesos relacionados con la química nocturna de NO_x no estén correctamente representados en el esquema químico estándar MOZART incluido en WRF-Chem (p. ej., la química heterogénea de N₂O₅ o la química activa del yodo nocturno; (Brown & Stutz, 2012; Saiz-Lopez et al., 2016)). Por último, estudios anteriores sugieren que los métodos estándar para las mediciones de NO₂ (es decir, la quimioluminiscencia) se ven potencialmente afectados por las interferencias, cuando los instrumentos también detectan otros compuestos que contienen nitrógeno, lo que conduce a una posible sobreestimación de los niveles de NO₂ observados (Dunlea et al., 2007).

5.3.2.2 Material Particulado (PM₁₀ y PM_{2.5})

En general, el modelo demostró un desempeño razonable para el PM simulado en ambos sitios de monitoreo (ver Tabla 5-4). De hecho, los valores criterio de referencia de Boylan & Russell (2006) (2006), MFB $\leq \pm 60\%$ y MFE $\leq 75\%$, se cumplieron para todas las simulaciones. En particular, los valores medios de PM₁₀ en EMC-I para GEAA_{np} se aproximaron más a las observaciones que los de EDGAR_{np}, los cuales mostraron una mayor sobreestimación (Figura 5-5b). Incluso cuando EDGAR_{np} presentó la mayor correlación para PM₁₀ ($r=0.23$), el MFB (52.7%) fue ~11 veces mayor que el de GEAA_{np} (4.7%) (ver Tabla 5-4). Por el contrario, GEAA_{np} y GEAA_{prf} mostraron una clara subestimación en CBC (Figura 5-3f) y el menor MB y MFB se observó en el caso de EDGAR_{np}.

La distribución de frecuencias para el PM₁₀ modelado en el caso de GEAA_{np} sigue el patrón de las observaciones en la estación EMC-I (Figura 5-4 b), aunque el pico modelado es más pronunciado y se desplaza a concentraciones más bajas que en las observaciones. A pesar de tener una subestimación general de PM, GEAA_{prf} y GEAA_{np} sobreestiman los valores de EMC-I en las primeras horas de la mañana (entre la 1:00 a.m. y las 7:00 a.m. Hora Local) (Figura 5-6). Esta sobreestimación nocturna coincide con la incapacidad del modelo para representar la evolución diurna de la PBL, que reduce la mezcla del aire y aumenta los niveles de NO₂, como se describe en la Sección 5.3.2.1. Sin embargo, la inclusión de un perfil temporal dentro de GEAA_{prf} disminuye la sobreestimación de las concentraciones

más pequeñas de PM_{10} y $PM_{2.5}$ a primera hora de la mañana, lo que pone de manifiesto la importancia de considerar la variación horaria de las emisiones contaminantes a lo largo del día (Puliafito et al., 2021, 2017, 2015). La distribución de frecuencias de EDGARnp se ajusta bien a las observaciones en CBC (Figura 5-4f), pero tiene un bajo coeficiente de correlación porque su ciclo diurno es inverso respecto a las mediciones (Figura 5-3). De hecho, EDGARnp presenta una marcada sobreestimación a primera hora de la mañana y una subestimación durante el día, lo que también es coherente con la evolución temporal de la PBL simulada.

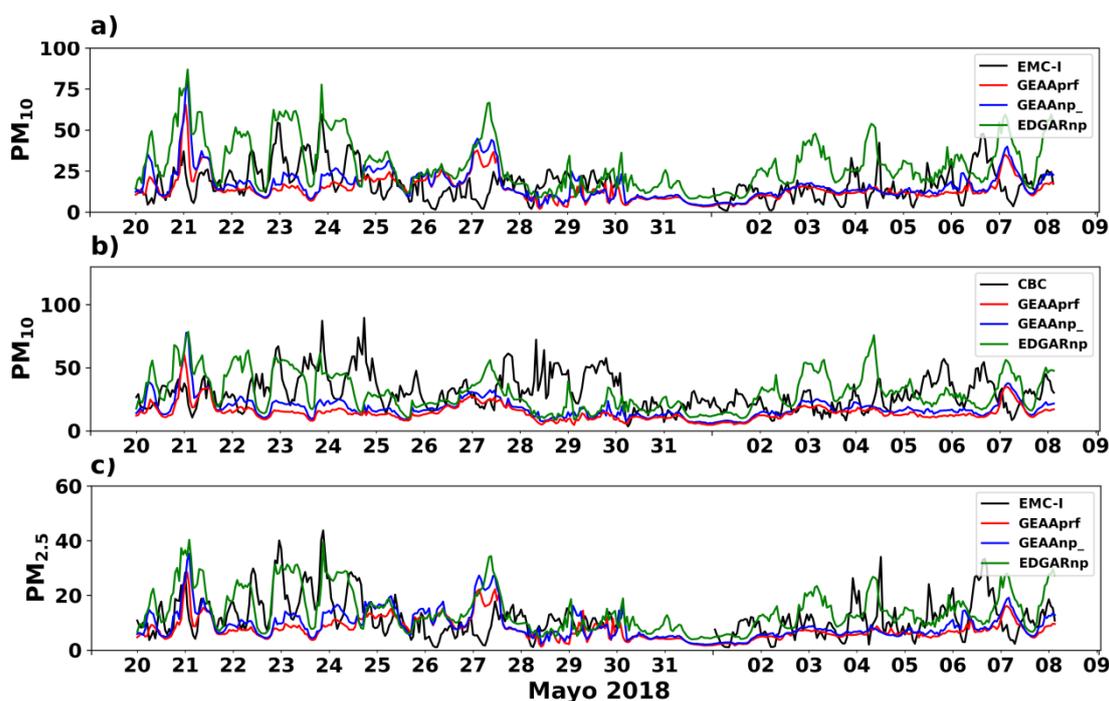


Figura 5-6. Series temporales horarias de material particulado superficial ($\mu\text{g m}^{-3}$) en cada sitio de monitoreo: a) PM_{10} en EMC-I, b) PM_{10} en CBC, y c) $PM_{2.5}$ en EMC-I, para las observaciones (negro) y todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). (Elaboración propia)

Es importante destacar que las estaciones de monitoreo utilizadas se encuentran en una ciudad con una morfología urbana caracterizada por la presencia de edificios de gran altura, lo que crea cañones urbanos. Esto implica que las observaciones probablemente reflejen principalmente las condiciones urbanas a nivel del suelo. De hecho, estudios previos compararon las mediciones de PM_{10} en Buenos Aires en diferentes lugares, y mostraron que es difícil obtener una alta correlación incluso para dos estaciones de medición muy cercanas a diferentes alturas (P1 a 2m y P4 a 15m), ya que las condiciones meteorológicas y de dispersión (ventilación) a escala local eran diferentes (Arkouli et al., 2010). Por lo tanto, es de esperar que los modelos regionales, como el WRF-Chem, no reproduzcan de manera completamente precisa la evolución temporal de los contaminantes en un entorno urbano donde predominan las dinámicas de microescala. En este caso, y a pesar de que el MFB y el MFE cumplen los criterios de validación, la variabilidad horaria de los aerosoles en ambos lugares de monitoreo no es captada completamente por el modelo, en parte debido a que los cañones urbanos no están

representados en la versión de WRF-Chem utilizada, y/o a un cómputo erróneo del modelo tanto en la altura de la capa de mezcla nocturna como en los procesos de deposición correspondientes (Borrego et al., 2003; Solazzo et al., 2012; Vardoulakis et al., 2003).

5.3.3 Evaluación espacial

La sensibilidad del modelo a los cambios en la distribución espacial y la resolución de las emisiones antropogénicas se analizó comparando los mapas de concentración superficial simulados con GEAA_{np} y EDGAR_{np} dentro del dominio con mayor resolución (d03, Figura 5-7). Las mayores concentraciones para ambas simulaciones se situaron en el centro de CABA, alcanzando niveles máximos $> 54 \mu\text{g m}^{-3}$ y $> 23 \mu\text{g m}^{-3}$ para NO_2 y PM_{10} respectivamente. En general, EDGAR_{np} presentó una mayor concentración de contaminantes en el centro urbano y una pluma contaminante más extensa sobre el área suburbana circundante, mientras que las simulaciones con el inventario GEAA-AEI presentaron valores más bajos dentro de la ciudad (excepto algunos puntos críticos locales) y una mayor concentración sobre todo en las pequeñas ciudades satélites y las carreteras intermunicipales que las conectan (Figura 5-7a). En el caso de PM_{10} , EDGAR_{np} mostró concentraciones significativamente más altas y homogéneamente aglomeradas en la zona urbana que se dispersan hacia la zona suburbana del sureste de la ciudad (Figura 5-7d). De hecho, la extensión de la pluma contaminante con concentraciones de $\text{PM}_{10} > 20 \mu\text{g m}^{-3}$ para EDGAR_{np} fue de $\sim 1200 \text{ km}^2$, mientras que para GEAA_{np} dicha área fue casi 30 veces menor ($\sim 40 \text{ km}^2$). Esto es consistente con las diferencias en las emisiones totales de PM dentro de los grandes centros urbanos identificadas entre los inventarios EDGAR-HTAP ($5.64 \text{ Ton día}^{-1}$) y GEAA-AEI ($15.3 \text{ Ton día}^{-1}$) (ver Sección 5.2.3 y Puliafito et al. (2015)). Para NO_2 , se encontraron diferencias similares, pero menos pronunciadas entre GEAA_{np} y EDGAR_{np}: la extensión de la pluma contaminante que superaba los $40 \mu\text{g m}^{-3}$ de NO_2 para GEAA_{np} fue 1.7 veces menor ($\sim 1000 \text{ km}^2$ para EDGAR_{np} frente a $\sim 590 \text{ km}^2$ para GEAA_{np}). Además, GEAA_{np}, que representa fuentes puntuales locales en una cuadrícula de alta resolución (con un valor promedio de $45.9 \mu\text{g m}^{-3}$, y un máximo de $71.9 \mu\text{g m}^{-3}$), mostró valores de puntos críticos ligeramente mayores que los de EDGAR_{np} (con un valor promedio de $47.6 \mu\text{g m}^{-3}$, y un máximo de $57.04 \mu\text{g m}^{-3}$) dentro de CABA.

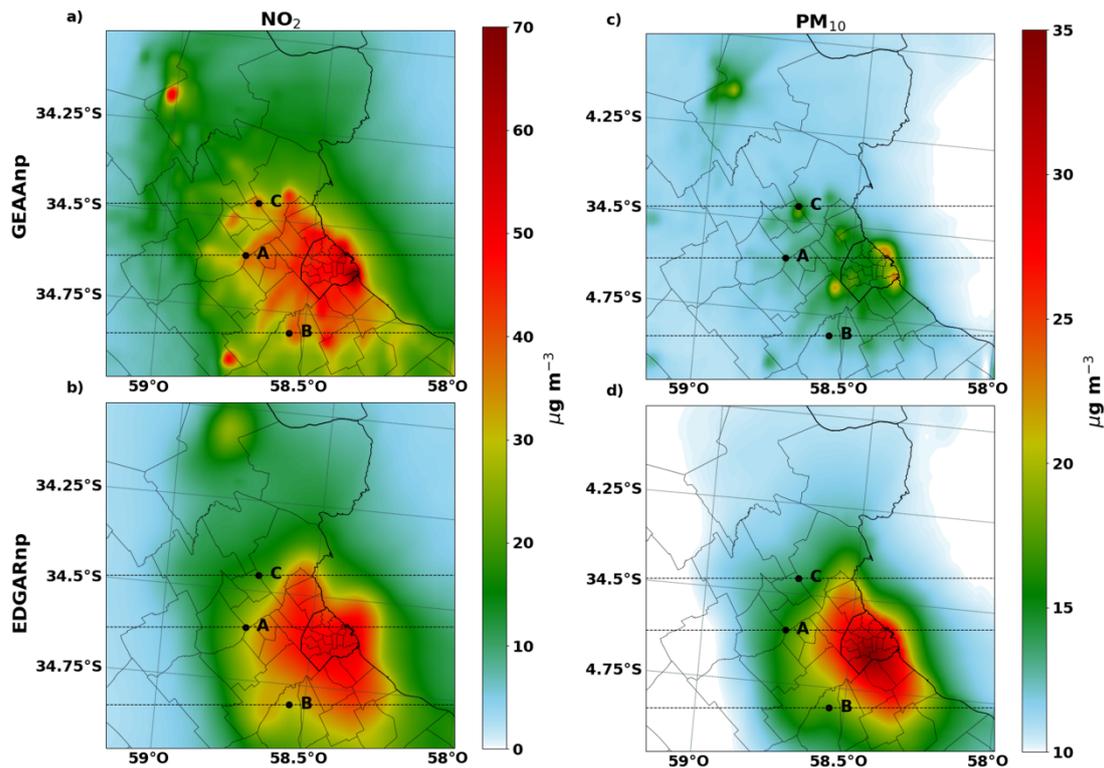


Figura 5-7. Concentraciones superficiales promedio ($\mu\text{g m}^{-3}$) de NO_2 para: a) GEAAnp b) EDGARnp y de PM_{10} para: c) GEAAnp d) EDGARnp para el periodo de simulación en el dominio más interno (d03). Las líneas horizontales representan las secciones transversales utilizadas para analizar los puntos de medición sugeridos A, B y C (ver la sección 5.4.5). (Elaboración propia)

Cabe destacar que las diferencias entre las simulaciones fueron menores dentro del centro de la ciudad de Buenos Aires (es decir, donde se encuentran las estaciones de calidad del aire; ver la Sección 5.3.2). Sin embargo, en otros sitios dentro del área suburbana (ver Sección 5.3.5), GEAAnp y EDGARnp mostraron diferencias significativas en la concentración superficial, estrechamente relacionadas con los cambios en la distribución de las emisiones antropogénicas (Figura 5-1). En particular, la alta resolución de GEA-AEI proporciona una estructura bien resuelta de carreteras y autopistas que se reflejó en las concentraciones medias simuladas de NO_2 . En el caso de PM_{10} se encontraron el mismo tipo de diferencias, aunque asociadas a los sectores industrial y energético. Por ejemplo, se observaron con más detalle los puntos críticos de concentración de PM_{10} para GEAAnp (Figura 5-7c), situados en las proximidades del Complejo Petroquímico de Dock Sud.

5.3.4 Comparación con datos satelitales

La distribución espacial de NO_2 para los diferentes inventarios de emisiones antropogénicas se evaluó comparando la columna de NO_2 troposférica simulada con las observaciones satelitales de TROPOMI (Figura 5-8). Para llevar a cabo la comparación, se remapearon los datos del producto TROPOMI NO_2 de nivel 2 (en moléculas cm^{-2}) en una proyección cilíndrica con una resolución de $0.1^\circ \times 0.1^\circ$. Se obtuvo una única matriz 2D georreferenciada promediando todos los conjuntos de datos satelitales. Del mismo

modo, se calculó la columna troposférica modelada (utilizando una definición térmica de la tropopausa) para las simulaciones del modelo WRF-Chem en el dominio principal de resolución más baja (d01) y se re proyectó en la misma cuadrícula cilíndrica de Latitud/Longitud utilizada para el producto TROPOMI NO₂. Se encontraron distribuciones espaciales y niveles de concentraciones de fondo similares entre ambas simulaciones y TROPOMI, aunque la extensión espacial de la pluma de NO₂ sobre el AMBA es considerablemente mayor para las salidas de WRF-Chem.

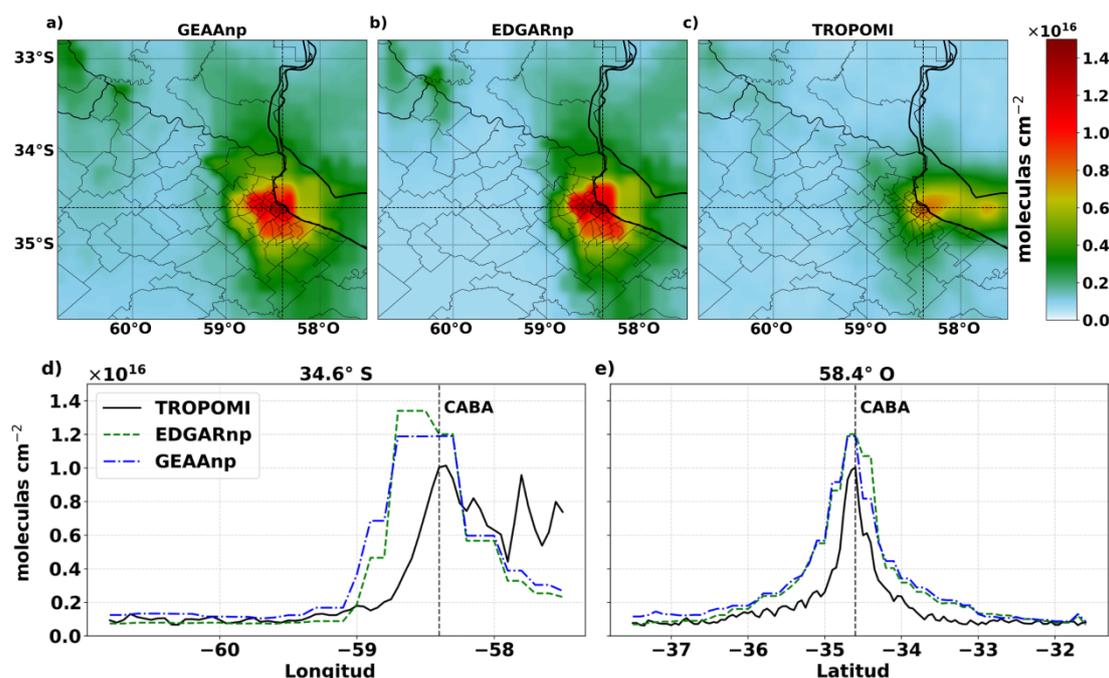


Figura 5-8. Columna troposférica de NO₂ (moléculas cm⁻²) promediada para el período modelado a partir de las simulaciones a) GEAAnp, b) EDGARnp y c) producto SSP-TROPOMI. Secciones transversales de la columna troposférica de NO₂ (moléculas cm⁻²) para el Área Metropolitana de Buenos Aires en d) 34.6° S y e) 58.4° O. La información de todos los paneles en esta figura corresponde a los datos obtenidos a partir de TROPOMI en una cuadrícula de resolución de 0.1° (negro) y los datos de NO₂ integrados verticalmente hasta la tropopausa dentro del d01 para los casos de simulación: EDGARnp (verde) y GEAAnp (azul). (Elaboración propia)

El análisis de la varianza (ANOVA) para las columnas troposféricas de ambas simulaciones (GEAAnp y EDGARnp) mostró diferencias significativas entre sus valores medios (valor $p < 0.01$). Esta diferencia se atribuye a la respuesta del modelo ante las variaciones de las emisiones antropogénicas, ya que ambas simulaciones se rigen por campos meteorológicos idénticos. La columna troposférica de NO₂ se sobrestimó tanto en el caso de GEAAnp como en el de EDGARnp principalmente en las proximidades de las fuentes de emisiones elevadas y mostró valores de error significativos de NMB >30% para EDGARnp y NMB >50% para GEAAnp. El mayor sesgo para GEAAnp se debe a los niveles de fondo ligeramente más altos sobre las zonas rurales (Tabla 5-2, d02). Independientemente de esto, ambas simulaciones alcanzaron una correlación positiva media-alta con TROPOMI ($r > 0.75$; Tabla 5-5). De acuerdo con estudios anteriores (Schaub et al., 2006), la información obtenida por satélite considera toda la columna vertical troposférica sobre una región determinada, la troposfera superior representa

una contribución menor y más del 80% de la columna de NO₂ procede de los primeros 500 m del modelo (es decir, las 5 capas más bajas del modelo). Por consiguiente, el efecto de mayor resolución superficial observado en los alrededores del AMBA cuando se considera el inventario GEAA-AEI (Figura 5-7) se diluye cuando se comparan las columnas troposféricas de NO₂ de GEAA_{np} y EDGAR_{np}.

Tabla 5-5. Comparación estadística de la columna troposférica de NO₂ entre las simulaciones EDGAR_{np} y GEAA_{np}, y el producto satelital deTROPOMI para la misma región representada en la Figura 5-8^a

TROPOMI Prom. (std) (10 ¹⁵)	Simulación	Modelación Prom. (std) (10 ¹⁵)	<i>r</i>	NMB
1.419 (1.17)	GEAA _{np}	2.25 (1.74)	0.77	58.2
	EDGAR _{np}	1.91 (1.86)	0.76	34.6

^a Promedio (Prom) y desviación estándar (std) del NO₂ se expresan en moléculas cm⁻². El NMB se expresa en porcentaje (%).

La Figura 5-8, también muestra las secciones latitudinales y longitudinales realizadas a través del centro de CABA (34° 36' S, 58°24' O) cerca de la costa este de Argentina, donde la columna troposférica de TROPOMI presenta un pico secundario sobre la costa uruguaya del Río De La Plata a 57°48' O. Este doble pico no fue capturado por ninguna de las simulaciones y es muy probable que esté relacionado con la falta de una fuente de emisión en el inventario global, ya que para las áreas geográficas fuera de Argentina (e.g., Uruguay) la entrada de emisiones de todas las simulaciones proviene de EDGAR-HTAP.

La mayor extensión de las plumas de NO₂ simuladas con respecto a TROPOMI sugiere que: i) el transporte de los contaminantes simulados desde la ciudad hacia las áreas circundantes es demasiado eficiente; ii) los procesos de remoción de NO₂ (ya sea partición química o deposición seca/húmeda) están subestimados; y/o iii) el inventario de emisiones sobrestima la magnitud de las fuentes de emisión de NO₂ dentro del AMBA. Esto se puede observar en la distribución espacial y en los tramos latitudinales/longitudinales promediados de la Figura 5-8, así como en otros centros urbanos del territorio argentino (ver Capítulo 6). Los resultados obtenidos en la Sección 5.3.2.1 muestran que el desempeño de las concentraciones superficiales de NO₂ durante el día en el centro de la ciudad fue bueno en términos generales. Sin embargo, las diferencias entre las simulaciones y los datos satelitales sugieren que dentro de la configuración base del esquema químico MOZART en WRF-Chem podría haber una falta de reacciones nocturnas y procesos de deposición o bajas eficiencias en el lavado de las especies de nitrógeno. La falta de mediciones de NO₂ en el área suburbana del AMBA y la escasa disponibilidad de redes de calidad del aire en otras ciudades de Argentina dificultan la realización de análisis adicionales. También cabe señalar que, debido a la gran variabilidad de los datos de nivel 2 de TROPOMI y al umbral de calidad recomendado, la realización de un gran promedio espacial y/o temporal de los datos satelitales podría dar lugar a puntos críticos de NO₂ más suavizados y menos pronunciados sobre las grandes ciudades (De Ruyter de Wildt et al., 2012; Folkert Boersma et al., 2015; Georgoulias et al., 2020).

5.3.5 Ubicación recomendada para futuras estaciones de calidad del aire

En la Sección 5.3.2 se mostró que, independientemente del inventario de emisiones antropogénicas considerado, todas las simulaciones de WRF-Chem obtuvieron un desempeño aceptable en comparación con las mediciones superficiales disponibles en el centro de CABA. Sin embargo, la distribución espacial modelada presentada en la Sección 5.3.3 mostró fuertes gradientes en las áreas suburbanas, donde los cambios en la resolución del inventario de emisiones utilizado tuvieron una mayor influencia (ver Figura 5-7). Por lo tanto, la ubicación actual de las estaciones de monitoreo no permite una evaluación adecuada de: i) cuán grande y variable es la pluma de contaminantes sobre el AMBA; y ii) cual inventario de emisiones reproduce mejor los niveles de contaminantes en el área circundante. En esta sección se analizaron las diferencias espaciales entre EDGARnp y GEAAnp para NO₂ y PM₁₀. El objetivo fue proponer ubicaciones pertinentes para llevar a cabo campañas de monitoreo en áreas donde se han identificado las mayores discrepancias entre los resultados simulados utilizando distintos inventarios. Asimismo, se buscó identificar puntos en la zona suburbana que presenten comportamientos distintos y que resulten de interés para una evaluación detallada.

La Figura 5-9 muestra las secciones transversales de concentraciones simuladas este-oeste a través de Buenos Aires, a partir de las cuales se proponen tres nuevos sitios de medición (puntos A, B y C en la Figura 5-7). En la sección transversal para el punto A (Figura 5-9a y d), las concentraciones de NO₂ para ambas simulaciones se comportan de manera similar dentro del centro de CABA. En efecto, la diferencia en el valor máximo modelado entre GEAAnp y EDGARnp es menor al ~5% en las cercanías del sitio de medición CBC. Sin embargo, hacia el oeste, GEAAnp muestra zonas locales donde las concentraciones máximas de NO₂ son hasta ~40% mayores que las de EDGARnp. Las concentraciones de PM₁₀ en este mismo lugar son un ~20% más altas para EDGARnp en comparación con GEAAnp, aunque para la primera se observa un suave descenso longitudinal a medida que se avanza fuera de la ciudad. En la sección transversal correspondiente al punto B (Figura 5-9b y e), las concentraciones de NO₂ para EDGARnp muestran solo dos picos principales, mientras que para GEAAnp la misma sección transversal distingue cinco zonas independientes de alta concentración. La ubicación de estas zonas coincide con las principales vías de acceso que atraviesan el sur de la ciudad. Los puntos A y B se seleccionaron con la intención de comparar el rendimiento de EDGAR-HTAP y GEAA-AEI, ya que muestran simultáneamente una mayor concentración de NO₂ y una menor concentración de PM₁₀ para la simulación de GEAAnp. Así, realizar campañas de medición en estos puntos permitirían una mejor estimación de la distribución de los contaminantes en el área suburbana del AMBA. Finalmente, la sección transversal en la parte norte de la ciudad (Figura 5-9c y f) fue seleccionada ya que cruza una pequeña área industrial (punto C) donde los valores máximos locales de NO₂ y PM₁₀ fueron predichos por GEAAnp pero no fueron simulados cuando se considera el inventario EDGAR-HTAP de menor resolución.

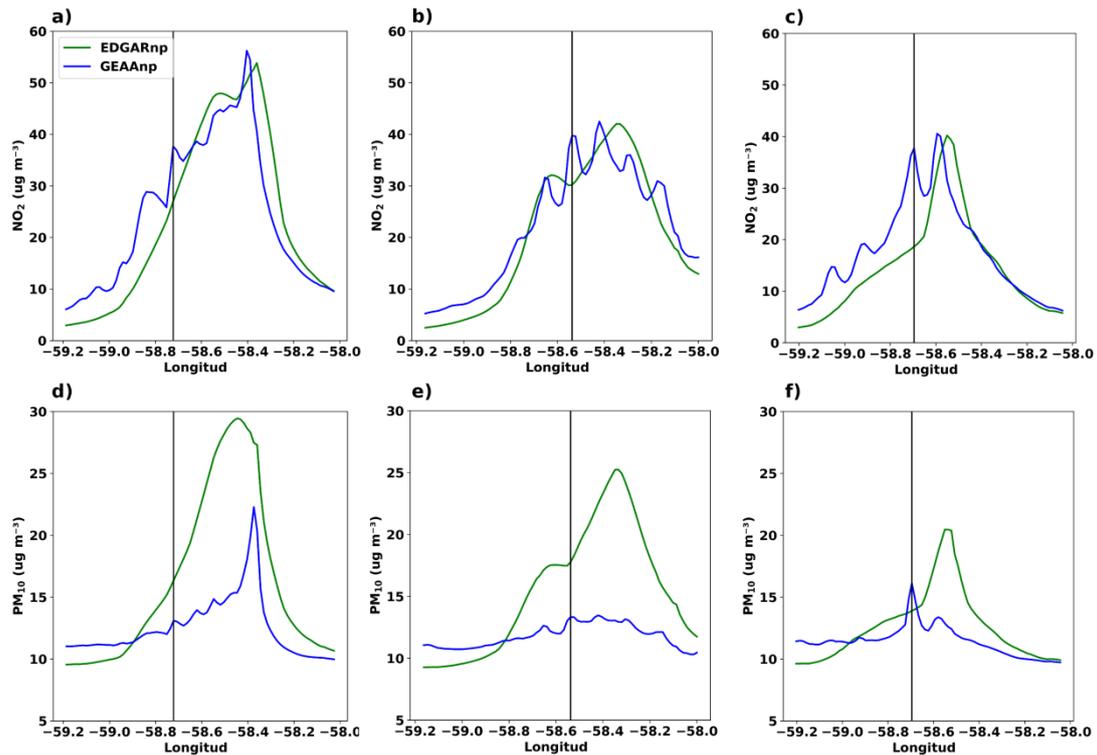


Figura 5-9. Secciones transversales de las concentraciones medias simuladas para GEAAAnp (azul) y EDGARnp (verde) en el Área Metropolitana de Buenos Aires situadas en: 34° 36' 10" S (punto A) para a) NO₂, d) PM₁₀; 34° 48' 22" S (punto B) para b) NO₂ y e) PM₁₀; 34° 27' 22" S (punto C) para c) NO₂ y f) PM₁₀. La ubicación en el dominio de simulación de los puntos A, B y C se muestra en la Figura 5-7. (Elaboración propia)

Como se pudo observar en la Figura 5-9, los cambios en la resolución y distribución espacial entre ambos inventarios derivan en importantes diferencias de concentraciones simuladas. Por lo tanto, agregar sitios de medición en los puntos seleccionados puede permitirnos evaluar si la mayor resolución del inventario GEAA-AEI representaría una mejora de la variabilidad espacio-temporal de las concentraciones en Buenos Aires. Además, al verificar el desempeño del modelo en estos sitios, la presente implementación del WRF-Chem de alta resolución basado en el inventario GEAA-AEI podría significar una importante herramienta de apoyo al diseño de redes de monitoreo de la calidad del aire o la planeación de campañas de medición. Además, dado que el inventario GEAA-AEI es un desarrollo a nivel nacional basado en conjuntos de datos de alta resolución referenciados geo-temporalmente, la validación espacio-temporal dentro de la ciudad más importante del país proporcionaría confianza en la aplicabilidad de enfoques equivalentes en otras ciudades y regiones de Argentina.

5.4 Conclusiones parciales

El desempeño del modelo para las concentraciones de NO₂, PM₁₀, PM_{2.5} y O₃ fue validado respecto a las mediciones de las estaciones de monitoreo de calidad del aire existentes en el Área Metropolitana de Buenos Aires (AMBA) durante el otoño austral de 2018. Los resultados muestran que las

concentraciones diurnas de contaminantes atmosféricos están influenciadas por la forma y distribución del perfil temporal de emisiones horarias, especialmente para el NO₂, donde la reducción de las emisiones nocturnas disminuyó el sesgo medio del modelo en ~50%. PM₁₀ y PM_{2.5} cumplieron en general los criterios de rendimiento del modelo, pero se produjo una subestimación en las simulaciones con GEAA-AEI y una sobreestimación en el caso de las simulaciones con EDGAR-HTAP. La comparación con las columnas de NO₂ troposférico derivadas de TROPOMI mostró una alta correlación positiva ($r > 0.75$) y un sesgo positivo. Se encontraron grandes discrepancias entre los patrones de distribución espacial de las simulaciones dentro del dominio más interno centrado en el AMBA (d03), sobre todo en zonas suburbanas donde no se dispone de observaciones. Finalmente, se proponen nuevas ubicaciones para sitios de monitoreo adicionales que permitan abordar tales diferencias y monitorear el tamaño y la forma de la pluma principal de contaminantes de la ciudad.

6 Modelado regional de la calidad del aire en alta resolución y sensibilidad estacional a los sectores de emisión antropogénicos

6.1 Introducción

Argentina, como muchos otros países de América Latina, se enfrenta a una serie de retos relacionados con la contaminación atmosférica. Debido al tamaño y la diversidad de su territorio, factores como las distintas actividades humanas, la geografía y las condiciones climáticas pueden variar significativamente de una zona a otra. Por ejemplo, en las zonas urbanas, el tráfico de vehículos, las actividades industriales como la producción de acero, petróleo y gas, la fabricación de productos químicos, así como la producción de energía eléctrica, son las principales fuentes de emisiones (Puliafito et al., 2021). En cambio, las zonas rurales sufren contaminación atmosférica debido a la quema de residuos agrícolas, la aplicación de fertilizantes y pesticidas y los incendios forestales, que pueden generar grandes cantidades de humo y partículas finas, contribuyendo así a la carga de aerosoles regional y mundial (Puliafito et al., 2020). Todas estas emisiones de gases contaminantes y partículas finas pueden tener graves consecuencias sobre la salud de la población y el medio ambiente en general, por lo que es imprescindible conocer las fuentes y los patrones de emisión en las distintas zonas para obtener una distribución espacio-temporal amplia y actualizada de los contaminantes atmosféricos.

Como se ha mencionado en el Capítulo 4, la escasez de medidas hace muy difícil obtener una caracterización espacio-temporal completa del comportamiento y distribución de las diferentes especies contaminantes, por lo que se recurre a los modelos atmosféricos. En este contexto, la disponibilidad de inventarios de emisiones fiables que alimenten dichos modelos es un requisito indispensable para comprender estos problemas ambientales y, por tanto, para alcanzar un conocimiento adecuado de los niveles de contaminación que permitan desarrollar las estrategias de control y mitigación pertinentes. Además, la realización de este tipo de estudios tanto a nivel local como regional también puede ayudar a identificar a las poblaciones más vulnerables y facilitar el desarrollo de planes de acción para mejorar la calidad de vida de la población, proteger la salud pública y el ambiente, y promover el desarrollo sostenible.

En este marco, estudios previos han aplicado el modelo WRF-Chem para simular la calidad del aire sobre varias regiones de Argentina, mostrando que el modelo es capaz de reproducir los patrones espacio-temporales observados de los contaminantes atmosféricos en esta región (Carrasco et al.,

2018; Castesana et al., 2022; Cremades et al., 2017; Fernandez et al., 2010; López-Noreña et al., 2022). Sin embargo, estos estudios se han limitado a evaluar las ciudades capitales y zonas fuertemente urbanizadas, donde hay datos de observaciones disponibles para comparar. Por otro lado, existen otros estudios aplicados con cobertura nacional, por ejemplo, Garcia-Ferreira et al. (2016) que realizaron simulaciones con WRF-Chimere para toda la Argentina en una resolución de celda de 36km, donde se validó el desempeño del modelo contra datos observacionales obtenidos para 3 ciudades capitales (Buenos Aires, Córdoba y Bahía Blanca) y recuperaciones satelitales del sensor OMI. Pero la validación del modelo con datos observados sigue estando limitada a las capitales y a un corto periodo de tiempo, y la validación con datos de satélite también tiene las limitaciones tanto de la resolución del sensor OMI como de la resolución del propio modelo.

La configuración regional implementada en los Capítulos 2 y 3, junto con los datos de reanálisis meteorológicos y los inventarios de emisión en alta resolución espacial recientemente disponibles, ofrecen una oportunidad única para ejecutar WRF-Chem sobre un dominio regional nacional en alta resolución (<12km para escalas regionales). Además, en el Capítulo 5 se comprobó que las concentraciones simuladas de NO₂, PM₁₀ y PM_{2.5} responden ante los cambios en las características espaciotemporales de las emisiones. De esta forma se demostró la importancia de utilizar como información de entrada para el modelo un inventario regional de emisiones antropogénicas, donde la distribución de la pluma contaminante distingue entre puntos críticos locales (hotspots) y características espaciales que se correlacionan con fuentes puntuales y autopistas, así como el efecto que tienen diferentes perfiles horarios de emisión sobre las concentraciones simuladas.

En función de lo anteriormente mencionado, y considerando la disponibilidad del inventario GEAA-AEI con alta resolución espacial, resolución temporal mensual y su desagregación detallada por actividades emisoras, resulta posible plantear una evaluación regional del impacto de los diferentes sectores emisores a lo largo del año sobre las concentraciones simuladas a diferentes escalas espaciales. De esta manera, el presente capítulo tiene como objetivo general proporcionar información detallada sobre las características de la contaminación atmosférica ligada a PM₁₀, PM_{2.5} y NO₂ en diferentes regiones de Argentina, identificar los sectores económicos que generan las mayores emisiones, y evaluar el impacto de dichas emisiones en la calidad del aire a nivel nacional y estacional. Sobre la base de los capítulos anteriores, se aplica lo aprendido en diferentes casos de estudio en el país con el fin de demostrar la potencialidad de la metodología expuesta. Para ello, se abordan los siguientes objetivos particulares: en primer lugar, se examinan las características espacio-temporales de las concentraciones atmosféricas simuladas y se evalúa el desempeño general del modelo, comparando los resultados obtenidos con la columna troposférica de TROPOMI. Posteriormente, se analiza el comportamiento estacional de las concentraciones simuladas en todo el país, incluyendo tanto ciudades capitales como zonas más remotas. Además, se investiga la relación entre las concentraciones de contaminantes y los

cambios en las emisiones antropogénicas con el propósito de identificar los sectores económicos que generan las mayores contribuciones en cuanto a emisiones atmosféricas en cada una de las zonas de estudio. Se utilizan diversas simulaciones de sensibilidad con el modelo WRF-Chem para conocer el impacto de dichos sectores en la calidad del aire y se evalúa su variación a nivel estacional. Esto, por un lado, actualiza el estado del arte en estudios regionales de calidad del aire, y por otro aporta nueva información que amplía el conocimiento al respecto en un país con imperiosa necesidad de iniciativas vinculadas a la caracterización de fuentes de contaminación atmosférica. Asimismo, se detalla una metodología que puede ser replicada donde resulte necesario.

6.2 Metodología

6.2.1 Área de estudio, dominio de simulación y definición de regiones

Las simulaciones se realizaron en un único dominio regional de alta resolución (Figura 6-1, d01), que abarca todo el territorio argentino, incluyendo parte de sus países vecinos (Brasil, Bolivia, Chile, Paraguay y Uruguay), así como porciones de los océanos Atlántico y Pacífico. Se seleccionó una resolución de celda de 10 km x 10 km y 26 niveles verticales, suficientemente fina como para permitir que el modelo reproduzca correctamente la variabilidad de los parámetros climáticos y químicos, así como su distribución en las capas más bajas de la atmósfera. Lograr tal detalle dentro de un dominio de escala regional fue posible gracias a los avances descritos en los Capítulos 2 y 3, que proporcionaron una representación adecuada de las características a pequeña escala inducidas por la compleja topografía de la región.

Argentina tiene aproximadamente 47 millones de habitantes y una superficie de 2.800.000 km² de territorio continental e insular. Su población está desigualmente distribuida, concentrándose principalmente en áreas densamente pobladas (> 7500 hab/km²) que se distribuyen en el 0.06% (< 190.000 ha) del territorio y en áreas urbanas de tamaño medio (entre 2500 y 7500 hab/km²) que ocupan el 0.68% del territorio (Puliafito et al., 2017). El país está dividido en 23 provincias y una ciudad autónoma. En términos socioeconómicos, existen diferencias evidentes entre las distintas áreas administrativas. El 60% de la población argentina se concentra en las provincias de Buenos Aires, Córdoba, Santa Fe y la Ciudad Autónoma de Buenos Aires, que representan el 22% de la superficie total de Argentina. Por lo tanto, como primera aproximación para investigar la heterogeneidad espacial de los factores que influyen en la calidad del aire se ha elegido una regionalización de la Argentina a partir de un criterio político-administrativo (INDEC, 2016; Puliafito et al., 2017), es decir, se han considerado las provincias como unidades de análisis y se las ha integrado en 6 regiones, tal cual se muestra en la Figura 6-1: Central, Noreste, Noroeste, Pampa, Patagonia y Oeste.

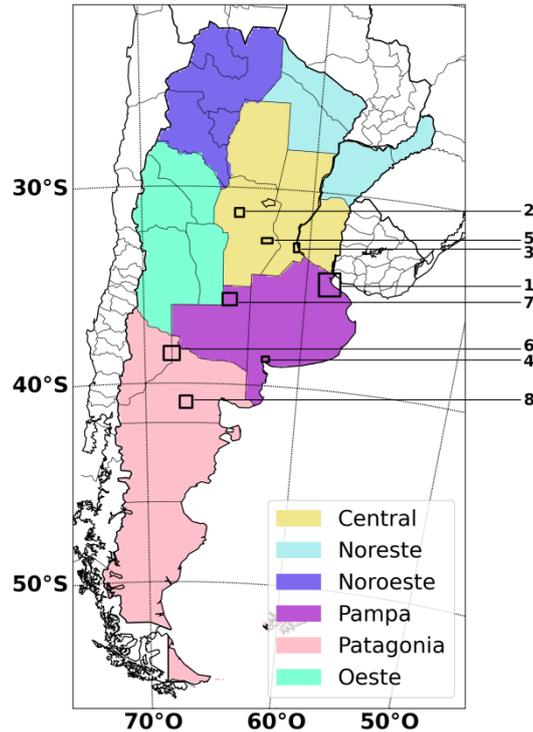


Figura 6-1. Dominio de simulación, regiones de Argentina delimitadas para este estudio (áreas en colores) y áreas de referencia seleccionadas (recuadros negros).

6.2.2 Configuración del modelo

En este caso de estudio, se realizaron cuatro simulaciones de un mes de duración cada una, para el año 2019. Con el fin de representar las condiciones meteorológicas y atmosféricas típicas de las cuatro estaciones del año, se han seleccionado los meses centrales de cada periodo: enero, abril, julio y octubre. Además, para cada uno de los 4 meses, se realizaron diferentes experimentos de sensibilidad, resultando en un total de 28 simulaciones (ver Sección 6.2.3). Todas las simulaciones se ejecutaron utilizando el sistema de modelado completo WRF-Chem-KPP descrito en el Capítulo 2, incluyendo la configuración regional optimizada de WPS para Argentina (Sección 2.1.2), con mapas de alta resolución para mejorar la representación de los campos de elevación del terreno y LULC (Cremades, 2017; Cremades et al., 2011; Fernandez et al., 2010; Mulena et al., 2016; Puliafito et al., 2015). En la Tabla 6-1 se resumen las parametrizaciones y datos de entrada utilizados. La metodología y la configuración del modelo para las simulaciones se describen en detalle en los Capítulos 2 y 3. Dicha configuración incluye el mecanismo químico MOZART-GOCART (Chin et al., 2000; Emmons et al., 2010), y el esquema Fast-J (Fast et al., 2006) para el cálculo de las tasas de fotólisis. Las IC/BC meteorológicas fueron tomadas de la base de datos GDAS/FNL, con una resolución horizontal de $0.25^\circ \times 0.25^\circ$ y resolución temporal de 6 horas (ver Sección 2.1.2). Finalmente, para garantizar una atmósfera inicial lo más realista posible, se utilizó la opción de química cíclica del modelo, que permite establecer las condiciones iniciales químicas (IC) a partir de una simulación anterior, en este caso se utilizó una simulación previa de un mes.

Adicionalmente, se utilizó un periodo de spin-up de 48h para permitir la estabilización de las IC/BC meteorológicas en la simulación. Las BC químicas para gases y aerosoles se extrajeron utilizando como entrada simulaciones globales realizadas con el modelo CAM-Chem (ver Sección 2.4).

Tabla 6-1. Resumen de la configuración de WRF-Chem para el caso de estudio regional ^a

Parametrizaciones Físicas y Químicas de WRF-Chem	Esquema Utilizado
Elevación del terreno	SRTM3 (Rodríguez et al., 2005)
LULC	USGS/GEAA (Puliafito et al., 2015)
Parametrización de microfísica de nubes	Eta (Ferrier, 1994)
Parametrización de radiación	RRTMG (Mlawer et al., 1997)
Parametrización de superficie	Noah Land Surface Model (Chen & Dudhia, 2001)
Parametrización de PBL	YSU (Hong & Lim, 2006)
Parametrización de cúmulos	Grell 3D (Grell & Dévényi, 2002)
Mecanismo de fase gaseosa	MOZART - KPP (Emmons et al., 2010)
Esquema de aerosoles	GOCART (Chin et al., 2000)
Inventario global de emisiones antropogénicas	EDGAR v5 2015 (Crippa et al., 2020)
Inventario regional de emisiones antropogénicas	GEAA-AEI v3.0M (Puliafito et al., 2021)
Especiación de NMVOCs	Siguiendo a Emmons et al. (2010) y Lopez-Noreña et al. (2019)
Deposición seca	Acoplada al suelo y la vegetación (Wesely, 1989)
Emisiones por quema de biomasa	GEAA-AEI v3.0M (Puliafito et al., 2021)
IC/BC meteorológicas	NCEP-FNL 0.25 grados (NCEP, 2015)
IC/BC químicas	CAM-Chem (Fernandez et al., 2017)
Resolución horizontal del dominio	10Km (d01)
Esquema de fotólisis	Fast-J (Fast et al., 2006)

^a los cambios en la configuración con respecto al Capítulo 5 se destacan en negrita.

6.2.3 Inventarios de emisión y casos de simulación

En este capítulo se utilizaron las emisiones antropogénicas provenientes del inventario regional GEAA-AEI cuyas principales características fueron descritas previamente en el Capítulo 3 (ver Sección 3.1.2). Dado que GEAA-AEI no considera las emisiones fuera del territorio argentino, para las zonas del dominio ubicadas fuera de la frontera del país se combinó con la base de datos global EDGARv5 a través de la herramienta anthro emis merge (ver Sección 3.1.3.3). Una descripción más detallada de las bases de datos puede encontrarse en Puliafito et al. (2021) y Janssens-Maenhout et al. (2019) respectivamente. Además, las diferencias entre EDGARv5 y EDGAR-HTAP (utilizado en el Capítulo 5) se describieron previamente en el Capítulo 3. La adaptación de las emisiones para este capítulo incluye la aplicación de perfiles temporales que consideran la variación horaria para las emisiones relacionadas con el sector del transporte, así como perfiles horarios obtenidos a partir de estadísticas nacionales de consumo energético representativas de la variación mensual y horaria de la demanda residencial de gas natural y del consumo industrial de combustible (ver Figura 3-7).

Tabla 6-2. Conjunto de sensibilidades realizadas por cada mes

Simulación	Descripción
Total (referencia)	Simulación con todos los sectores de emisión incluidos
Transporte	Simulación considerando sólo la categoría Transporte
Residencial	Simulación considerando sólo la categoría Residencial
Industrial	Simulación considerando sólo la categoría Industrial
Energía	Simulación considerando sólo la categoría Energía
Agricultura + quema de biomasa (Ag_bb)	Simulación considerando sólo la categoría Ag_bb
ICBC	Simulación sin emisiones antropogénicas

Utilizando la configuración descrita anteriormente se realizó una simulación de referencia (Total) para el mes central de cada una de las estaciones del año 2019 (enero, abril, julio y octubre). Estas simulaciones consideran todos los sectores de emisión disponibles en el inventario GEAA-AEI. Adicionalmente para cuantificar las contribuciones de las fuentes individuales a las concentraciones simuladas y su variación estacional, se realizaron simulaciones de sensibilidad para cada mes, conservando la misma configuración de la simulación de referencia, pero habilitando únicamente las emisiones de cada uno de los distintos sectores por turnos (ver Tabla 6-2). Para garantizar la coherencia a la hora de combinar el inventario de emisiones global con el regional, los sectores de emisión de ambos se clasificaron y agruparon en cinco categorías (energía, industrial, residencial, transporte y Ag_bb (agricultura + quema de biomasa)) según su código correspondiente del IPCC 2006, como se muestra en la Tabla 6-3. Cada una de las cinco sensibilidades de cada mes tiene en cuenta únicamente los sectores pertenecientes a la categoría correspondiente. Finalmente, para identificar la influencia de las IC/BC sobre las distintas especies, se realizó una simulación adicional para cada mes con las emisiones antropogénicas desactivadas.

Teniendo en cuenta los resultados de la comparación de inventarios de emisiones, obtenidos en el Capítulo 5, y dado el elevado costo computacional de las simulaciones, la separación por categorías de emisión se realizó solamente para la combinación del inventario regional (GEAA-AEI, en Argentina) con el global (EDGARv5, fuera de Argentina). El estudio equivalente utilizando exclusivamente el inventario EDGARv5 no se llevó a cabo, pues por cada combinación de inventarios era necesario realizar 24 simulaciones, sumado a las 4 simulaciones sin emisiones antropogénicas para cada mes. Sin embargo, en la Tabla 6-3 se muestra la distribución completa para ambos inventarios y queda a disponibilidad para futuros estudios de comparación.

Tabla 6-3. Coherencia entre sectores de emisión para los inventarios GEAA-AEI y EDGAR ^a

Categoría	Sector GEAA-AEI	Código IPCC 2006	Sector EDGAR	Código IPCC 2006
Ag_bb	Suelos agrícolas	3C2+3C3+3C4+3C7	Suelos agrícolas	3C2+3C3+3C4+3C7
	Ganadería	3A	Gestión del estiércol	3A2
	Quema de biomasa	5B	Quema de residuos agrícolas	3C1b
Energía	Venteo de pozos de petróleo	1B2ai	Explotación de combustible	1B1a+1B2aiii2+1B2aiii3+1B2bi+1B2bii
	Industria de la energía	1A1a	Industria de la energía	1A1a
	Refinerías	1A1b+1B2	Refinerías de petróleo e industria de la transformación	1A1b+1A1ci+1A1cii+1A5biii+1B1b+1B2aiii6+1B2biii3+1B1c
Transporte	Transporte por carretera	1A3b	Transporte por carretera sin resuspensión	1A3b_noRES
	Transporte en barco	1A3d+1C2	Transporte en barco	1A3d
	Transporte ferroviario	1A3c	Ferrocarriles, oleoductos, transporte fuera de la carretera	1A3c+1A3e
	Aviación	1A3a	Ascenso y descenso de la aviación	1A3a_CDS
			Vuelo de crucero	1A3a_CRS
			Aterrizaje y despegue de la aviación	1A3a_LTO
			Aviación supersónica	1A3a_SPS
Residencial	Edificios comerciales	1A4+1A5	Energía para edificios	1A4+1A5
	Edificios gubernamentales	1A4+1A5		
	Edificios residenciales	1A4+1A5		
Industrial	Combustión para fábricas	1A2	Combustión para fábricas	1A2
	Procesos industriales	2	Producción de minerales no metálicos	2A
			Procesos químicos	2B
			Producción de metales no ferrosos	2C3+2C4+2C5+2C6+2C7
			Uso no energético de los combustibles	2D1+2D2+2D4
			Uso de disolventes y productos	2D3+2E+2F+2G
Alimentación y papel	2H			
Total				

^a La escala de colores utilizada para resaltar los diferentes sectores es la misma que la utilizada en la Figura 6-7 y la Figura 6-8

Las emisiones totales mensuales de PM₁₀, PM_{2.5} y NO₂ dentro de Argentina y para cada región, se muestran en las Tablas 6.4, 6.5 y 6.6. Se destaca que el sector Ag_bb es el principal contribuyente a las emisiones de PM₁₀ y PM_{2.5}, responsable de aproximadamente 49-57% y 33-41% de las emisiones nacionales, respectivamente, dependiendo del mes. Las emisiones de NO₂ se deben principalmente a las actividades relacionadas con el sector del transporte (58-65%). Las emisiones totales más altas de PM₁₀, PM_{2.5} y NO₂ ocurren a nivel nacional en julio, pero esta tendencia puede variar dependiendo de la región. Las regiones Central y Pampeana tienen emisiones mensuales relativamente más altas en comparación con otras regiones, lo que está estrechamente relacionado con los patrones de distribución poblacional en el país, ya que algunas provincias de estas regiones (Buenos Aires, Córdoba, Santa Fe y la Ciudad Autónoma de Buenos Aires) concentran aproximadamente el 60% de la población argentina. La región Central tiene las emisiones más altas de PM_{2.5} y PM₁₀, representando alrededor del 30-35% de las emisiones totales. En esta región, el sector industrial (30-44%) es el principal contribuyente a las emisiones totales de PM_{2.5}, mientras que el sector Ag_bb (44-49%) es el más importante para PM₁₀. Cabe destacar que en particular para Ag_bb, la región Noreste también tiene una contribución relevante en las especies de PM, principalmente en los meses de abril (PM_{2.5}: 29%, PM₁₀: 25%) y julio (PM_{2.5}: 28%, PM₁₀: 32%). La región Pampeana aporta la mayor parte de las emisiones de NO₂, en torno al 38-40%, siendo el transporte el principal contribuyente. Cabe destacar que, las fluctuaciones mensuales en las emisiones de varios sectores están condicionadas por la disponibilidad de gas natural, el principal combustible consumido por la industria en Argentina. Por ejemplo, el consumo de gas natural por parte del sector residencial aumenta en los meses de invierno, lo que resulta en un aumento en las emisiones relacionadas, mientras que, en el sector industrial, las emisiones disminuyen debido a menor disponibilidad de gas natural en esos meses. Del mismo modo, en el sector energético, las centrales térmicas funcionan principalmente con gas natural y necesitan utilizar gasóleo o carbón durante las horas pico y en los meses de invierno (Puliafito et al., 2021). En cambio, el sector transporte mantiene unos valores de emisión relativamente constantes a lo largo del año, registrando valores ligeramente superiores en los meses de julio y octubre.

Tabla 6-4. Emisiones mensuales totales de PM_{2.5} (Mg mes⁻¹)^a

Sector	Mes	Argentina	Central	Noreste	Noroeste	Pampa	Patagonia	Oeste
Ag_bb	Ene.	1637.44 (41.1)	448.43 (27.3)	218.05 (13.3)	62.41 (3.8)	545.45 (33.3)	241.23 (14.7)	121.86 (7.4)
	Abr.	1676.41 (40.4)	429.77 (25.6)	493.68 (29.4)	68.15 (4.1)	527.43 (31.4)	52.33 (3.1)	105.04 (6.2)
	Jul.	1919.45 (35.7)	496.14 (25.8)	619.06 (32.2)	155.71 (8.1)	502.32 (26.1)	58.57 (3.1)	87.62 (4.5)
	Oct.	1573.73 (33.8)	428.95 (27.26)	341.98 (21.7)	70.77 (4.5)	582.36 (37)	53.67 (3.4)	95.98 (6.1)
Energía	Ene.	106.49 (2.6)	14.80 (13.9)	17.37 (16.3)	13.25 (12.4)	40.47 (38)	14.83 (13.9)	5.76 (5.4)
	Abr.	58.06 (1.4)	6.70 (11.5)	2.16 (3.7)	5.18 (8.9)	24.12 (41.5)	16.61 (28.6)	3.29 (5.6)
	Jul.	97.29 (1.8)	27.21 (27.9)	1.18 (1.2)	9.34 (9.6)	38.91 (39.9)	17.08 (17.5)	3.58 (3.6)
	Oct.	83.31 (1.7)	13.47 (16.1)	6.56 (7.9)	9.52 (11.4)	32.64 (39.1)	15.70 (18.8)	5.41 (6.5)
Transporte	Ene.	856.35 (21.4)	270.74 (31.6)	66.54 (7.8)	58.81 (6.8)	289.83 (33.8)	96.49 (11.2)	73.93 (8.6)
	Abr.	843.11 (20.3)	266.31 (31.5)	65.67 (7.8)	58.13 (6.8)	285.21 (33.8)	94.71 (11.2)	73.08 (8.6)
	Jul.	919.74 (17.1)	289.38 (31.4)	72.20 (7.8)	64.23 (6.9)	310.72 (33.7)	102.45 (11.1)	80.75 (8.7)
	Oct.	950.76 (20.4)	298.47 (31.3)	74.97 (7.9)	66.89 (7.1)	320.94 (33.7)	105.38 (11.1)	84.10 (8.8)
Residencial	Ene.	258.90 (6.4)	48.30 (18.6)	88.94 (34.3)	37.04 (14.3)	57.79 (22.3)	14.25 (5.5)	12.56 (4.8)
	Abr.	499.18 (12.1)	93.34 (18.7)	172.70 (34.6)	71.83 (14.3)	110.33 (22.1)	26.84 (5.3)	24.14 (4.8)
	Jul.	1483.46 (27.6)	277.64 (18.7)	514.69 (34.7)	213.94 (14.4)	326.56 (22.1)	78.94 (5.3)	71.65 (4.8)
	Oct.	703.64 (15.1)	131.60 (18.7)	243.63 (34.6)	101.31 (14.4)	155.34 (22.1)	37.72 (5.3)	34.02 (4.8)
Industrial	Ene.	1129.38 (28.3)	629.21 (55.7)	0.29 (0.03)	91.82 (8.1)	276.18 (24.4)	79.82 (7.1)	52.06 (4.6)
	Abr.	1064.71 (25.7)	595.75 (55.9)	0.26 (0.02)	86.05 (8.1)	264.48 (24.8)	77.62 (7.2)	40.55 (3.8)
	Jul.	953.91 (17.7)	524.91 (55.1)	0.00 (0)	60.38 (6.3)	274.03 (28.7)	67.19 (7.1)	27.41 (2.8)
	Oct.	1344.89 (28.8)	703.72 (52.3)	65.24 (4.8)	90.53 (6.7)	371.98 (27.6)	72.50 (5.3)	40.64 (3.1)
Total	Ene.	3988.55	1411.49 (35.3)	391.20 (9.8)	263.33 (6.6)	1209.71 (30.3)	446.61 (11.2)	266.17 (6.6)
	Abr.	4141.47	1391.88 (33.6)	734.47 (17.7)	289.33 (6.9)	1211.57 (29.2)	268.10 (6.4)	246.10 (5.9)
	Jul.	5373.85	1615.28 (30.1)	1207.13 (22.4)	503.60 (9.3)	1452.54 (27.1)	324.23 (6.1)	271.01 (5.1)
	Oct.	4656.33	1576.21 (33.8)	732.38 (15.7)	339.02 (7.2)	1463.26 (31.4)	284.98 (6.1)	260.15 (5.5)

^a Los valores entre paréntesis (en negrita) en la columna de Argentina indican la contribución porcentual mensual de cada sector al total nacional. Los valores entre paréntesis en las columnas de las regiones indican la contribución porcentual mensual de cada región al sector correspondiente.

Tabla 6-5. Emisiones mensuales totales de PM₁₀ (Mg mes⁻¹)^a

Sector	Mes	Argentina	Central	Noreste	Noroeste	Pampa	Patagonia	Oeste
Ag_bb	Ene.	3623.06 (57)	1063.11 (29.3)	387.07 (10.6)	118.81 (3.2)	1227.18 (33.8)	564.83 (15.5)	262.05 (7.2)
	Abr.	3645.05 (56.2)	1025.16 (28.1)	944.62 (25.9)	130.75 (3.5)	1190.76 (32.6)	133.41 (3.6)	220.34 (6.1)
	Jul.	4151.39 (51.7)	1164.50 (28.1)	1198.92 (28.8)	307.96 (7.4)	1146.12 (27.6)	146.99 (3.5)	186.88 (4.5)
	Oct.	3448.99 (49.5)	1027.15 (29.7)	638.59 (18.5)	135.82 (3.9)	1307.51 (37.9)	136.63 (3.9)	203.26 (5.8)
Energía	Ene.	121.50 (1.9)	16.65 (13.7)	19.90 (16.3)	14.73 (12.1)	46.68 (38.4)	16.95 (13.9)	6.60 (5.4)
	Abr.	67.08 (1.1)	7.42 (11.1)	2.82 (4.2)	5.69 (8.4)	28.48 (42.4)	19.02 (28.3)	3.65 (5.4)
	Jul.	132.60 (1.6)	50.15 (37.8)	2.07 (1.56)	10.38 (7.8)	45.72 (34.4)	19.87 (14.9)	4.41 (3.3)
	Oct.	99.47 (1.4)	18.41 (18.5)	7.86 (7.9)	10.53 (10.5)	38.36 (38.5)	18.19 (18.2)	6.12 (6.1)
Transporte	Ene.	937.66 (14.7)	296.75 (31.6)	72.47 (7.7)	64.24 (6.8)	317.80 (33.8)	105.60 (11.26)	80.80 (8.6)
	Abr.	923.19 (14.2)	291.90 (31.6)	71.52 (7.7)	63.50 (6.8)	312.74 (33.8)	103.65 (11.23)	79.88 (8.6)
	Jul.	1006.97 (12.5)	317.13 (31.4)	78.62 (7.8)	70.17 (6.9)	340.68 (33.8)	112.10 (11.1)	88.27 (8.7)
	Oct.	1040.72 (14.9)	327.02 (31.4)	81.64 (7.8)	73.06 (7.1)	351.80 (33.8)	115.29 (11.1)	91.90 (8.8)
Residencial	Ene.	266.70 (4.2)	49.82 (18.6)	91.86 (34.4)	38.24 (14.3)	59.27 (22.2)	14.59 (5.4)	12.92 (4.8)
	Abr.	513.33 (7.9)	96.10 (18.7)	178.02 (34.6)	74.00 (14.4)	113.01 (22.1)	27.40 (5.3)	24.79 (4.8)
	Jul.	1522.16 (18.9)	285.22 (18.7)	529.35 (34.7)	219.93 (14.4)	333.85 (21.9)	80.33 (5.2)	73.41 (4.8)
	Oct.	721.98 (10.3)	135.19 (18.7)	250.57 (34.7)	104.15 (14.4)	158.78 (21.9)	38.42 (5.3)	34.85 (4.8)
Industrial	Ene.	1407.72 (22.1)	703.09 (49.9)	0.39 (0.03)	110.44 (7.8)	355.92 (25.2)	151.67 (10.7)	86.21 (6.1)
	Abr.	1329.43 (20.5)	666.66 (50.1)	0.35 (0.03)	103.90 (7.8)	338.20 (25.4)	147.39 (11.1)	72.93 (5.4)
	Jul.	1203.03 (15.1)	605.39 (50.32)	0.00 (0)	68.00 (5.6)	347.02 (28.8)	138.33 (11.5)	44.28 (3.6)
	Oct.	1652.02 (23.7)	810.02 (49.0)	70.60 (4.2)	100.72 (6.1)	463.64 (28.1)	141.48 (8.5)	65.27 (3.9)
Total	Ene.	6356.65	2129.42 (33.5)	571.67 (8.9)	346.46 (5.4)	2006.85 (31.5)	853.63 (13.4)	448.57 (7.1)
	Abr.	6478.08	2087.23 (32.2)	1197.32 (18.4)	377.84 (5.8)	1983.20 (30.6)	430.87 (6.6)	401.59 (6.2)
	Jul.	8016.15	2422.39 (30.2)	1808.97 (22.5)	676.45 (8.4)	2213.39 (27.6)	497.62 (6.2)	397.25 (4.9)
	Oct.	6963.18	2317.79 (33.29)	1049.25 (15.1)	424.28 (6.1)	2320.10 (33.3)	450.01 (6.4)	401.40 (5.7)

^a Los valores entre paréntesis (en negrita) en la columna de Argentina indican la contribución porcentual mensual de cada sector al total nacional. Los valores entre paréntesis en las columnas de las regiones indican la contribución porcentual mensual de cada región al sector correspondiente.

Tabla 6-6. Emisiones mensuales totales de NO₂ (Mg mes⁻¹)^a

Sector	Mes	Argentina	Central	Noreste	Noroeste	Pampa	Patagonia	Oeste
Ag_bb	Ene.	880.69 (11.2)	352.07 (40)	58.20 (6.6)	60.58 (6.9)	367.71 (41.8)	6.95 (0.8)	35.16 (4)
	Abr.	855.08 (11.8)	340.88 (39.9)	60.72 (7.1)	58.76 (6.9)	356.29 (41.7)	3.66 (0.4)	34.77 (4.1)
	Jul.	885.77 (9.9)	353.01 (39.9)	64.57 (7.3)	62.10 (7)	367.42 (41.5)	3.89 (0.4)	34.77 (3.9)
	Oct.	881.04 (10.3)	351.97 (39.9)	60.10 (6.8)	60.73 (6.9)	369.20 (41.9)	3.78 (0.4)	35.25 (4)
Energía	Ene.	1003.21 (12.8)	133.51 (13.3)	92.96 (9.3)	127.44 (12.7)	425.42 (42.4)	168.92 (16.8)	54.97 (5.5)
	Abr.	639.56 (8.8)	75.18 (11.8)	13.19 (2.1)	60.87 (9.5)	263.52 (41.2)	193.29 (30.2)	33.50 (5.2)
	Jul.	997.94 (11.2)	205.18 (20.6)	9.74 (1)	104.36 (10.5)	442.79 (44.4)	198.73 (19.9)	37.14 (3.7)
	Oct.	892.97 (10.5)	139.97 (15.7)	36.30 (4.1)	97.59 (10.9)	383.72 (43)	183.06 (20.5)	52.33 (5.9)
Transporte	Ene.	5086.42 (64.9)	1254.41 (24.7)	423.59 (8.3)	469.15 (9.2)	1806.48 (35.5)	548.24 (10.8)	584.49 (11.5)
	Abr.	4728.06 (65.3)	1171.09 (24.8)	389.80 (8.2)	434.97 (9.2)	1685.14 (35.6)	504.29 (10.7)	542.69 (11.5)
	Jul.	5163.13 (58.1)	1280.07 (24.8)	425.47 (8.2)	475.32 (9.2)	1839.61 (35.6)	549.59 (10.6)	593.01 (11.5)
	Oct.	5270.21 (62.1)	1307.64 (24.8)	435.56 (8.3)	485.14 (9.2)	1875.01 (35.6)	561.66 (10.7)	605.12 (11.5)
Residencial	Ene.	300.74 (3.8)	43.94 (14.6)	5.14 (1.7)	10.99 (3.7)	157.66 (52.4)	62.12 (20.7)	20.89 (6.9)
	Abr.	450.33 (6.2)	66.17 (14.7)	8.10 (1.8)	16.60 (3.7)	235.69 (52.3)	92.54 (20.5)	31.22 (6.9)
	Jul.	1396.91 (15.7)	206.47 (14.8)	26.42 (1.9)	52.00 (3.7)	729.81 (52.2)	285.52 (20.4)	96.67 (6.9)
	Oct.	681.34 (8.1)	100.37 (14.7)	12.52 (1.8)	25.22 (3.7)	356.32 (52.3)	139.69 (20.5)	47.20 (6.9)
Industrial	Ene.	556.97 (7.1)	240.87 (43.2)	0.09 (0)	30.43 (5.5)	198.59 (35.7)	74.15 (13.3)	12.83 (2.3)
	Abr.	564.53 (7.8)	243.94 (43.2)	0.09 (0)	30.31 (5.4)	201.81 (35.7)	75.25 (13.3)	13.13 (2.3)
	Jul.	444.04 (5)	188.95 (42.6)	0.02 (9)	23.75 (5.3)	159.31 (35.9)	61.02 (13.7)	10.98 (2.5)
	Oct.	751.61 (8.8)	333.99 (44.4)	44.14 (5.9)	38.76 (5.2)	218.51 (29.1)	98.38 (13.1)	17.76 (2.4)
Total	Ene.	7828.02	2024.81 (25.9)	579.97 (7.4)	698.59 (8.9)	2955.86 (37.8)	860.37 (11)	708.35 (9)
	Abr.	7237.55	1897.27 (26.2)	471.89 (6.5)	601.51 (8.3)	2742.45 (37.9)	869.03 (12)	655.32 (9.1)
	Jul.	8887.78	2233.69 (25.1)	526.22 (5.9)	717.53 (8.1)	3538.93 (39.8)	1098.74 (12.4)	772.57 (8.7)
	Oct.	8477.17	2233.94 (26.4)	588.62 (6.9)	707.45 (8.3)	3202.77 (37.8)	986.56 (11.6)	757.66 (8.9)

^a los valores entre paréntesis (en negrita) en la columna de Argentina indican la contribución porcentual mensual de cada sector al total nacional. Los valores entre paréntesis en las columnas de las regiones indican la contribución porcentual mensual de cada región al sector correspondiente.

6.2.4 Selección de áreas de referencia

En el caso de estudio sub-regional (Capítulo 5) se evaluó el rendimiento de la configuración del modelo en relación con las observaciones *in-situ* y los datos obtenidos por satélite. A pesar de que las observaciones *in-situ* son uno de los conjuntos de datos más precisos y confiables para la evaluación de un modelo regional (Sicard et al., 2021), la escasa disponibilidad de estaciones de medición de contaminantes en todo el país (ver Capítulo 4) hace que este tipo de evaluación para el caso de estudio regional se vea muy limitada. Con el fin de superar esta falta de datos para comparar en términos de heterogeneidad espacial, la evaluación del rendimiento del modelo se realizó comparando la columna troposférica simulada de NO₂ con datos obtenidos del satélite TROPOMI (Georgoulas et al., 2020; Veefkind et al., 2012). Para obtener información detallada sobre la obtención y procesamiento de los datos satelitales ver Capítulo 4. No se realiza una comparación equivalente para PM porque al momento no se cuenta con información satelital disponible para realizar este tipo de validación en el periodo de tiempo simulado.

Los resultados obtenidos para NO₂ en la simulación de referencia (Total) se compararon con el producto satelital para los cuatro meses sobre todo el dominio de simulación. Del mismo modo, para analizar el rendimiento del modelo en función de los distintos sectores de emisión, se utilizó el inventario de emisiones para identificar grupos de celdas o áreas de referencia (ARF) dentro de Argentina, en las que predominaban las emisiones procedentes de un tipo específico de fuente (fuentes de área en zonas urbanas y rurales, fuentes lineales y fuentes puntuales). En estas zonas, los resultados de la columna troposférica simulada también se compararon con los datos TROPOMI. La Tabla 6-7 presenta una lista de las ARF seleccionadas, así como sus principales características.

Tabla 6-7. Descripción de las áreas de referencia para la evaluación del modelo

Áreas de referencia (ARF)	Región	Número de celdas	Tipo de fuentes
1 AMBA	Pampa	156	Área - urbana
2 Córdoba	Central	25	Área - urbana
3 Rosario	Central	15	Área - urbana
4 Bahía Blanca	Pampa	12	Área - urbana
5 Ruta 9	Central	18	Lineal
6 Fuentes puntuales (Centrales térmicas y refinerías)	Patagonia	72	Puntual
7 Cultivos	Pampa	56	Área - rural
8 Condiciones de fondo	Patagonia	49	Área - rural

Para las fuentes de área-urbanas se tomaron grupos de celdas correspondientes a cuatro ciudades del país (ARF1: AMBA, ARF2: Córdoba, ARF3: Rosario y ARF4: Bahía Blanca). Estas ciudades presentan

características diferentes en cuanto al aporte porcentual que reciben de los distintos sectores respecto del total de emisiones de cada área (Tabla 6-8). Si bien en las cuatro ciudades se observa un mayor aporte de los sectores transporte y residencial, también hay otros sectores que se destacan. Por ejemplo, en el caso de AMBA (ARF1) y Bahía Blanca (ARF4) se encuentran altas emisiones en el sector energía, relacionadas con la presencia dos importantes polos petroquímicos del país, mientras que la ciudad de Rosario (ARF3) muestra una contribución significativa del sector industrial. Para delimitar estas áreas se tuvo en cuenta que el recuadro seleccionado incluya todas las celdas con uso de suelo urbano.

Se delimitó como fuente de área-rural (ARF7) una zona ubicada en la región de la Pampa, en la que se identificaron celdas con emisiones predominantemente vinculadas a la producción agrícola y ganadera. En esta área las emisiones del sector Ag_bb representan entre 55-62% de las emisiones totales. Para la fuente lineal (ARF5) se seleccionaron celdas pertenecientes al tramo Rosario-Córdoba de la ruta nacional número 9 (Ruta 9), identificado como uno de los tramos más transitados de dicha ruta y del país. Se seleccionó un tramo en el medio de la ruta de manera que estuviese suficientemente alejado de los dos grandes centros urbanos que comunica. Como se puede observar en la Tabla 6-8, en esta zona las emisiones del sector transporte representan alrededor de un (73-82%) de las emisiones totales, mientras que las contribuciones promedio de los demás sectores son menores al 7%. El ARF6, correspondiente a las fuentes puntuales se ubica en un segmento de la región de la Patagonia donde se identificaron celdas con un 70-96% de contribución proveniente del sector energético. Dichas celdas coinciden con la ubicación de centrales termoeléctricas y refinerías. Finalmente, para evaluar el comportamiento de las concentraciones de las condiciones de fondo, se seleccionó un área al sur del dominio (ARF8), en la región Patagónica, cuyas celdas no estaban sujetas a fuentes puntuales, ciudades o carreteras rurales muy transitadas. Como puede observarse en la Tabla 6-8, las emisiones totales mensuales en esta área son muy bajas o nulas al igual que el aporte de cada uno de los sectores.

Tabla 6-8. Emisiones totales mensuales para NO₂ en las áreas de referencia (Mg mes⁻¹) para diferentes sectores ^a

ARF	Mes	Total	Transporte	Residencial	Industrial	Energía	Ag_bb
1 AMBA	Ene	1779.38	1199.87 (67.4)	123.78 (7)	66.11 (3.7)	382.61 (21.5)	7.02 (0.4)
	Abr	1666.60	1122.04 (67.3)	184.99 (11.1)	67.96 (4.1)	284.47 (17.1)	7.14 (0.4)
	Jul	2339.93	1222.60 (52.2)	572.83 (24.5)	56.83 (2.4)	480.75 (20.5)	6.92 (0.3)
	Oct	1967.74	1243.58 (63.2)	279.71 (14.2)	65.46 (3.3)	371.78 (18.9)	7.22 (0.4)
2 Córdoba	Ene	196.18	180.78 (92.2)	11.37 (5.8)	2.72 (1.4)	0.44 (0.2)	0.86 (0.4)
	Abr	190.90	170.04 (89.1)	17.02 (8.9)	2.78 (1.5)	0.23 (0.1)	0.84 (0.4)
	Jul	242.29	186.02 (76.8)	52.77 (21.8)	2.49 (1)	0.14 (0.1)	0.86 (0.4)
	Oct	219.64	188.84 (86)	25.74 (11.7)	4.00 (1.8)	0.21 (0.1)	0.86 (0.4)
3 Rosario	Ene	123.01	91.64 (74.5)	5.96 (4.8)	23.51 (19.1)	1.26 (1)	0.65 (0.5)
	Abr	121.18	85.87 (70.9)	8.92 (7.4)	24.88 (20.5)	0.87 (0.7)	0.63 (0.5)
	Jul	142.72	93.67 (65.6)	27.69 (19.4)	18.03 (12.6)	2.68 (1.9)	0.65 (0.5)
	Oct	141.02	95.21 (67.5)	13.50 (9.6)	28.82 (20.4)	2.84 (2)	0.65 (0.5)
4 Bahía Blanca	Ene	33.94	15.06 (44.4)	3.61 (10.6)	3.07 (9)	11.42 (33.6)	0.77 (2.3)
	Abr	29.82	14.18 (47.6)	5.39 (18.1)	3.10 (10.4)	6.39 (21.4)	0.75 (2.5)
	Jul	47.27	15.31 (32.4)	16.64 (35.2)	2.34 (5)	12.20 (25.8)	0.78 (1.7)
	Oct	48.52	15.57 (32.1)	8.14 (16.8)	6.26 (12.9)	17.59 (36.3)	0.96 (2)
5 Ruta 9	Ene	12.79	10.22 (79.9)	0.48 (3.8)	0.00	1.09 (8.5)	1.00 (7.8)
	Abr	11.22	9.44 (84.1)	0.72 (6.4)	0.00	0.09 (0.8)	0.97 (8.6)
	Jul	14.50	10.31 (71.1)	2.25 (15.5)	0.00	0.94 (6.5)	1.00 (6.9)
	Oct	14.37	10.56 (73.5)	1.10 (7.7)	1.23 (8.6)	0.49 (3.4)	1.00 (7)
6 Fuentes puntuales	Ene	85.14	22.62 (26.6)	2.45 (2.8)	0.04 (0.1)	59.97 (70.4)	0.05 (0.1)
	Abr	98.36	20.96 (21.3)	3.66 (3.6)	0.04 (0.1)	73.64 (74.9)	0.05 (0.1)
	Jul	116.68	22.92 (19.6)	11.30 (9.6)	0.03 (0.1)	82.38 (70.5)	0.05 (0.1)
	Oct	89.33	23.40 (26.2)	5.53 (6.1)	0.05 (0.1)	60.29 (67.5)	0.05 (0.1)
7 Cultivos	Ene	10.53	3.66 (34.8)	0.35 (3.3)	0.00	0.00	6.52 (61.9)
	Abr	10.41	3.38 (32.5)	0.53 (5.1)	0.00	0.00	6.50 (62.4)
	Jul	11.84	3.69 (31.2)	1.62 (13.7)	0.00	0.00	6.53 (55.2)
	Oct	11.27	3.78 (33.5)	0.79 (7)	0.00	0.00	6.69 (59.4)
8 Condiciones de Fondo	Ene	0.04	0.03 (75)	0.00	0.00	0.00	0.01 (25)
	Abr	0.04	0.03 (75)	0.00	0.00	0.00	0.01 (25)
	Jul	0.05	0.03 (60)	0.00	0.00	0.00	0.01 (20)
	Oct	0.05	0.03 (60)	0.00	0.00	0.00	0.01 (20)

^a los valores entre paréntesis indican la contribución porcentual mensual de cada sector al total mensual de cada área de referencia.

6.3 Resultados y discusión

El análisis de los resultados de este capítulo se centra en las concentraciones medias mensuales. En la Sección 6.3.1, se presenta una comparación entre la columna troposférica de NO₂ obtenida a partir del satélite TROPOMI y la columna troposférica calculada a partir de las simulaciones de referencia (Total)

para las cuatro estaciones del año 2019. En las Secciones 6.3.2, 6.3.3 y 6.3.4 se examina la variabilidad estacional de las concentraciones simuladas de PM_{10} , NO_2 y $PM_{2.5}$ y la respectiva contribución de los distintos sectores de emisión a la calidad del aire simulada tanto a nivel nacional como para las diferentes regiones y ARF consideradas dentro del dominio.

6.3.1 Evaluación del modelo

En la Figura 6-2 se comparan las distribuciones espaciales de la columna de NO_2 troposférico de TROPOMI y WRF-Chem sobre el dominio de simulación. Para minimizar las perturbaciones y reducir el ruido, ambos conjuntos de datos se redimensionaron a una resolución de $0.1^\circ \times 0.1^\circ$ y se promediaron mensualmente. Tanto el modelo como el satélite mostraron, durante todos los meses, mayor contenido de NO_2 troposférico sobre las regiones Pampa, Norte y Central, con puntos de alta concentración situados en correspondencia con grandes zonas urbanizadas como las ciudades de Buenos Aires, Córdoba, Mendoza, y Santiago de Chile (Chile). Los valores más bajos se registraron en la zona sur sobre la Patagonia. La Tabla 6-9 muestra las comparaciones estadísticas mensuales dentro del territorio argentino. La correlación espacial promedio osciló entre 0.71 (octubre) y 0.84 (julio). El NMB (ver definición en Sección 4.4) entre la columna troposférica modelada y satelital mostró una ligera subestimación del modelo durante los periodos de enero (-2%) y octubre (-6%), mientras que las concentraciones promedio fueron significativamente sobreestimadas por WRF-Chem los meses de abril (51%) y julio (81%), principalmente sobre las regiones más contaminadas. El patrón estacional de la columna de NO_2 simulada se desvía del de TROPOMI, presentando concentraciones medias más elevadas en abril y julio (Tabla 6-9), en contraste con el satélite, donde se observan las concentraciones medias más elevadas en enero y octubre. A pesar de esta discrepancia, tanto el modelo como el satélite mostraron los valores máximos más elevados en abril y julio. El modelo simula correctamente la afluencia de NO_2 troposférico desde el noreste del dominio de simulación hacia el norte de Argentina, a pesar de la sobreestimación en abril y julio. Los datos del satélite y del modelo también coinciden en mostrar valores bajos de NO_2 en el oeste de Argentina por encima de la cordillera. Por otra parte, la distribución espacial de los puntos de mayores concentraciones al oeste de la cordillera a lo largo de Chile se simula correctamente, pero se sobrestima la extensión de la pluma que se extiende hacia el norte y hacia el Océano Pacífico desde Santiago de Chile y otras ciudades importantes de Chile. Lo anterior se debe probablemente a su ubicación en una zona costera y montañosa con un terreno complejo, lo que da lugar a una mayor incertidumbre en la simulación de parámetros meteorológicos como el viento y, por tanto, repercute en las tasas de transporte y dispersión de NO_2 .

Tabla 6-9. Comparación estadística de la columna troposférica de NO₂ entre las simulaciones de WRF-Chem, y el producto satelital deTROPOMI para los meses de enero, abril, julio y octubre ^a

Mes	TROPOMI		Simulación		r	MB (10 ¹⁵)	NMB	RMSE (10 ¹⁵)
	Prom (std) (10 ¹⁵)	Max (10 ¹⁵)	Prom (std) (10 ¹⁵)	Max (10 ¹⁵)				
Ene	0.438 (0.280)	5.28	0.429 (0.23)	7.16	0.76	-0.009	-2	0.182
Abr	0.367 (0.235)	8.23	0.557 (0.60)	25.5	0.81	0.189	51	0.476
Jul	0.403 (0.364)	10.7	0.730 (0.74)	22.1	0.84	0.327	81	0.582
Oct	0.566 (0.299)	5.15	0.533 (0.51)	18.7	0.71	-0.032	-6	0.367

^a Promedio (Prom), máximo (max), desviación estándar (std), RMSEy MB del NO₂ se expresan en moléculas cm⁻². El NMB se expresa en porcentaje (%).

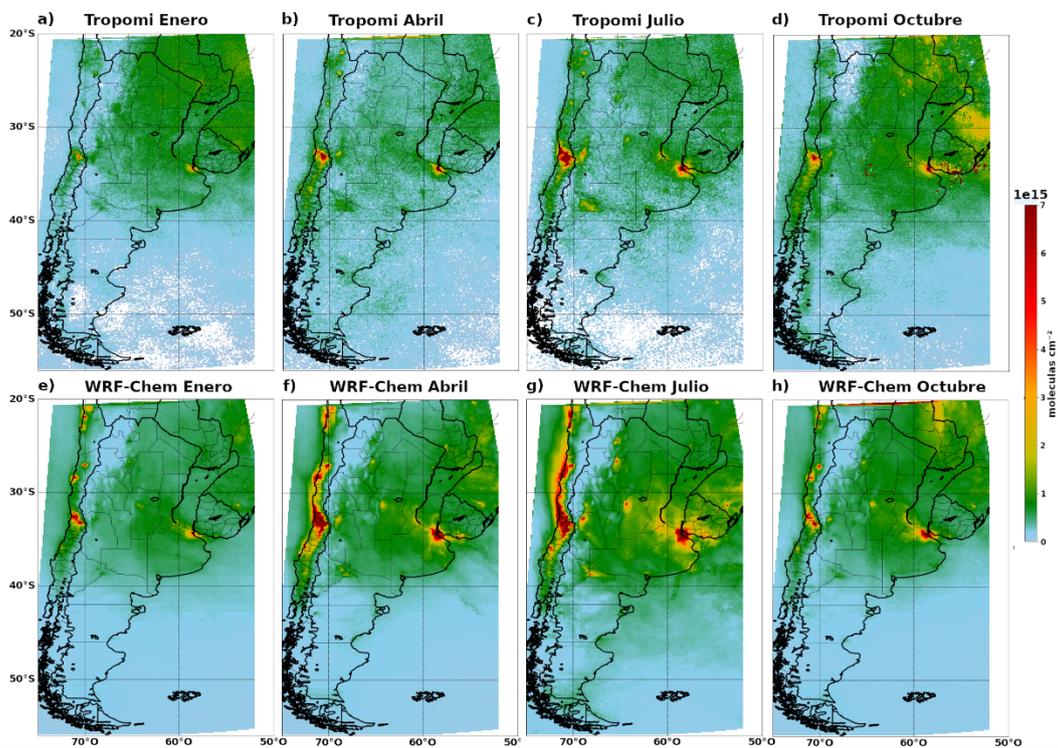


Figura 6-2. Comparación de la columna troposférica de NO₂, (moléculas cm⁻²) para TROPOMI en a) enero b) abril, c) julio y d) octubre, y para WRF-Chem en e) enero, f) abril, g) julio y h) octubre. (Elaboración propia)

La Figura 6-2 muestra que tanto las columnas de NO₂ del modelo como las del satélite aumentan sobre las zonas urbanas y las áreas del dominio relacionadas con fuentes puntuales (como centrales eléctricas y refinerías), lo cual concuerda bien con los patrones de emisión. Sin embargo, también se observan discrepancias en las concentraciones sobre algunas regiones. Con el fin de realizar una evaluación más detallada, se seleccionaron varias ARF en función del tipo de emisiones predominantes, así como zonas de condiciones de fondo en las que no predomina ningún sector en particular (ver sección 6.2.4). La Tabla 6-10 muestra la comparación estadística modelo-satélite de las columnas de NO₂ en cada uno de los 4 meses de simulación para las ARF seleccionadas. Se encontraron coeficientes de correlación más elevados (en promedio 0.7) para las zonas urbanas (ARF1, ARF2, ARF3 y ARF4) y para las zonas de

fuentes puntuales (ARF6), lo que demuestra la correspondencia de las distribuciones espaciales de emisiones con las columnas simuladas y satelitales. Las áreas con menores emisiones, como las carreteras (ARF5), los cultivos (ARF7) y las condiciones de fondo (ARF8) mostraron correlaciones más bajas. La separación por meses muestra una clara dependencia estacional de las concentraciones de NO₂ simuladas, siendo en general mayores durante el invierno (julio). Este comportamiento es especialmente relevante cerca de los núcleos urbanos, como puede observarse en AMBA y Córdoba donde los valores medios simulados para julio son entre 3 y 4 veces superiores a los de enero. A diferencia de ello, el gradiente entre meses es mucho menor en las áreas rurales (ARF7) y de fondo (ARF8).

Tabla 6-10. Comparación estadística de la columna troposférica de NO₂ entre las simulaciones de WRF-Chem, y el producto satelital de TROPOMI para las áreas de referencia en los meses de enero, abril, julio y octubre ^a

ARF	Mes	TROPOMI		Simulación		r	NMB
		Prom (std) (10 ¹⁵)	Max (10 ¹⁵)	Prom (std) (10 ¹⁵)	Max (10 ¹⁵)		
1 AMBA	Ene	1.42 (0.85)	5.28	1.98 (1.21)	7.16	0.74	39
	Abr	2.09 (1.47)	8.23	6.57 (4.98)	25.5	0.88	214
	Jul	3.55 (1.90)	10.7	8.14 (4.46)	22.1	0.90	129
	Oct	2.52 (1.22)	5.83	4.44 (3.81)	17.5	0.76	76
2 Córdoba	Ene	0.72 (0.13)	1.16	1.03 (0.17)	1.33	0.48	41
	Abr	0.77 (0.17)	1.27	1.92 (0.61)	3.78	0.77	148
	Jul	1.29 (0.44)	2.44	3.30 (0.97)	5.58	0.75	157
	Oct	1.02 (0.19)	1.57	1.81 (0.67)	3.20	0.48	78
3 Rosario	Ene	0.92 (0.18)	1.43	0.98 (0.09)	1.22	0.75	7
	Abr	0.96 (0.22)	1.38	2.28 (0.47)	3.34	0.58	135
	Jul	1.76 (0.25)	2.27	3.07 (0.62)	4.79	0.55	75
	Oct	1.14 (0.12)	1.44	1.93 (0.30)	2.62	0.73	69
4 Bahía Blanca	Ene	0.68 (0.13)	0.90	0.53 (0.05)	0.65	0.70	—23
	Abr	0.74(0.27)	1.17	0.68 (0.13)	0.92	0.57	—8
	Jul	0.92 (0.27)	1.33	1.03 (0.18)	1.31	0.82	12
	Oct	0.84 (0.12)	1.11	0.59 (0.14)	0.916	0.83	—29
5 Ruta 9	Ene	0.67 (0.08)	0.84	0.78 (0.02)	0.84	—0.33	15
	Abr	0.61(0.08)	0.77	0.93 (0.05)	1.00	—0.33	53
	Jul	0.62 (0.12)	0.86	1.26 (0.06)	1.38	—0.03	102
	Oct	0.86 (0.10)	1.16	0.93 (0.02)	0.96	0.31	—8
6 Fuentes puntuales	Ene	0.46 (0.11)	0.79	0.51 (0.15)	1.16	0.67	12
	Abr	0.77 (0.16)	1.24	1.03 (0.48)	3.24	0.51	34
	Jul	1.36 (0.37)	2.65	1.68 (0.87)	4.38	0.67	23
	Oct	0.63 (0.12)	1.07	0.58 (0.21)	1.28	0.54	—8
7 Cultivos	Ene	0.40 (0.07)	0.56	0.56 (0.04)	0.63	0.42	40
	Abr	0.43 (0.10)	0.66	0.74 (0.04)	0.82	—0.15	69
	Jul	0.39 (0.12)	0.64	0.91 (0.04)	1.04	0.21	132
	Oct	0.64 (0.09)	0.90	0.63 (0.07)	0.82	0.34	—1
8 Condiciones de fondo	Ene	0.12 (0.04)	0.22	0.22 (0.01)	0.25	0.45	87
	Abr	0.24 (0.09)	0.43	0.22 (0.02)	0.26	0.44	—8
	Jul	0.19 (0.08)	0.44	0.29 (0.05)	0.40	0.39	52
	Oct	0.23 (0.05)	0.41	0.20 (0.01)	0.23	0.16	15

^a Promedio (Prom), máximo (max) y desviación estándar (std) de NO₂ se expresan en moléculas cm⁻². El NMB se expresa en porcentaje (%).

Por otro lado, trabajos previos de validación con redes de monitoreo global tales como *Pandonia Global Network* (PGN) y *The Network for the Detection of Atmospheric Composition Change* (NDACC) (Verhoelst et al., 2021; Wang et al., 2022), han informado que las columnas troposféricas de NO₂ de TROPOMI presentan un sesgo negativo en comparación con otras herramientas de medición como MAX-DOAS y OMI, alcanzando hasta un -51% en áreas contaminadas y hasta un -37% en condiciones relativamente limpias (Verhoelst et al., 2021). En concordancia con estos estudios, los resultados obtenidos en este capítulo también muestran que las zonas más contaminadas (ARF1, ARF2 y ARF3) correspondientes a las 3 ciudades más pobladas de Argentina mostraron una mayor sobreestimación en las columnas de NO₂ simuladas (en promedio 97%) mientras que para las zonas menos contaminadas (ARF7 y ARF8) el sesgo promedio fue del 44%. Finalmente, las diferencias mencionadas no pueden atribuirse únicamente a los datos de TROPOMI, ya que, además del sesgo propio del satélite existen otros factores. Por ejemplo, la química no lineal del NO₂ puede contribuir a los errores del modelo, ya que es especialmente importante cuando se considera la dilución y el transporte las plumas procedentes de focos de altas concentraciones (p. ej. las centrales térmicas). Además, la relación NO₂/NO_x puede verse influenciada por factores proporcionados por las IC/BC específicas de cada lugar y momento del año, tales como los gradientes espaciales, las concentraciones de fondo O₃ y la relación NO₂/NO_x de las mismas concentraciones de fondo (Wang et al., 2011).

6.3.2 Influencia de las condiciones iniciales y de contorno

En los Capítulos 2 y 3 se discutió la importancia que tiene la información proporcionada en los archivos de entrada sobre el resultado de una simulación. El uso de diferentes IC/BC, al igual que los inventarios de emisiones antropogénicas, tiene un efecto significativo en la precisión de las predicciones del modelo, ya que su objetivo es reflejar las concentraciones de fondo de una forma más realista (Cifuentes et al., 2021).

En esta tesis, las IC/BC se tomaron del modelo global CAM-Chem, dichas IC/BC tienen un comportamiento estacional y una distribución espacial específica. Esto permite una mejor representación de la variabilidad espacio-temporal de las concentraciones de fondo en la simulación, a diferencia de los perfiles constantes que vienen por defecto en el modelo WRF-Chem.

La Figura 6-3 muestra las concentraciones medias mensuales simuladas de NO₂, PM₁₀ y PM_{2.5} para Argentina comparando la simulación de referencia (Total) con la simulación de sensibilidad que no contiene emisiones antropogénicas (ICBC). En el caso de NO₂, las concentraciones obtenidas a partir de la simulación ICBC son bajas en comparación con la simulación Total, lo que sugiere que las variaciones de NO₂ simuladas están asociadas principalmente a los patrones de emisión en el área de estudio y, en

menor medida, al transporte de NO₂ desde fuera del dominio de simulación. Los resultados obtenidos para NO₂ son coherentes con investigaciones previas que analizaron el impacto de diferentes IC/BC químicas y meteorológicas en los resultados de la simulación (Ritter et al., 2013), dichos estudios señalan un efecto mínimo, con variaciones generalmente menores a 0.8 µg m⁻³ entre las distintas pruebas de sensibilidad.

Por el contrario, en el caso de PM, se observaron valores elevados en la simulación ICBC en relación con la simulación Total. Las variaciones estacionales en las concentraciones superficiales de ambas simulaciones coincidieron en algunos meses. Por ejemplo, en enero, cuando las concentraciones simuladas en ICBC fueron más bajas, la concentración media mensual en la simulación Total también mostró un valor más bajo. En cambio, en octubre, cuando las concentraciones en la simulación ICBC fueron más altas, las concentraciones medias mensuales en la simulación Total fueron correspondientemente elevadas. Sin embargo, en otros meses, las concentraciones de ambas simulaciones no siguieron el mismo comportamiento estacional. Por ejemplo, en abril, la concentración de PM₁₀ en la simulación ICBC (6.21 µg m⁻³) fue muy similar a la de enero (6.15 µg m⁻³) pero las concentraciones mensuales en la simulación Total mostraron una diferencia mayor con valores de 6.8 µg m⁻³ en enero y 8.1 µg m⁻³ en abril. Por último, cabe aclarar que la influencia de las IC tiene un mayor impacto al inicio de la simulación y desaparece después de un periodo de tiempo determinado, por lo que el efecto de las IC/BC sobre las concentraciones promedio mensuales está principalmente determinado por las BC que son actualizadas en cada paso de tiempo de la simulación. Las BC, es decir, los aerosoles transportados por circulación de mesoescala hacia el interior del dominio desempeñan un papel importante en la dinámica espacio-temporal del PM a nivel regional. No obstante, la estacionalidad en la simulación Total surge de la influencia combinada de las IC/BC y las emisiones, por tanto, al eliminar el efecto de las IC/BC se podrían observar mejor las influencias estacionales impulsadas principalmente por las emisiones y sus transformaciones químicas y meteorológicas.

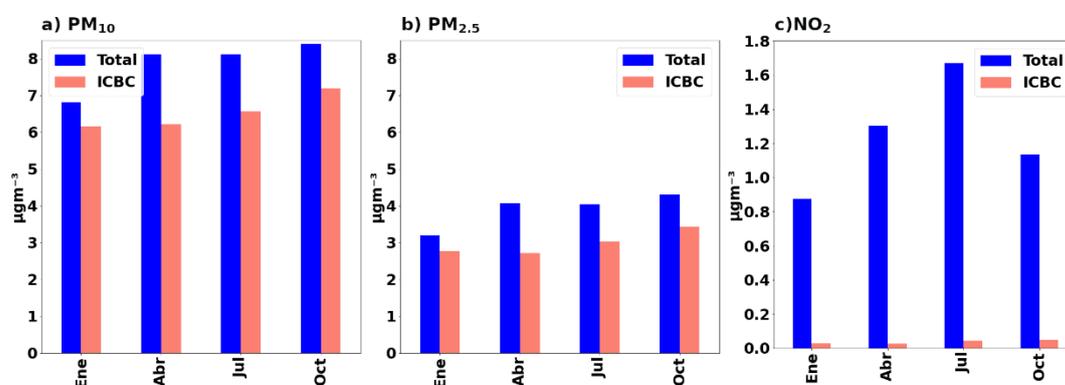


Figura 6-3. Concentraciones promedio mensuales para la simulación de referencia (Total) y la simulación con las emisiones antropogénicas apagadas (ICBC) para las especies: a) PM₁₀, b) PM_{2.5} y c) NO₂. (Elaboración propia)

Una vez identificadas estas diferencias, tanto a la simulación total como a cada una de las sensibilidades obtenidas para los distintos sectores, mostradas en las Secciones 6.3.3 y 6.3.4, se le restaron las correspondientes concentraciones obtenidas para la simulación ICBC. Esto se hizo con el objetivo de garantizar el discernimiento entre los patrones espaciales y estacionales atribuidos a las emisiones antropogénicas y aquellos patrones que podrían deberse a la implementación de las IC/BC.

6.3.3 Variabilidad espacio-temporal de las concentraciones superficiales simuladas

A continuación, se presentan los resultados de las concentraciones superficiales simuladas con WRF-Chem, con el objetivo de analizar los patrones de contaminación espaciales y estacionales para NO₂ (Figura 6-4), PM_{2.5} (Figura 6-5) y PM₁₀ (Figura 6-6). En las figuras se muestra el mapa promedio anual para toda Argentina y los diagramas de barras con el promedio mensual en las diferentes regiones y áreas de referencia.

6.3.3.1 Dióxido de nitrógeno (NO₂)

Los valores de referencia internacional (ver Sección 4.2) establecen que la concentración anual promedio de NO₂ no debe exceder los 10 µg m⁻³. Estos límites se establecen considerando los efectos negativos que el NO₂ puede tener en la salud humana y el medio ambiente. El análisis de las concentraciones superficiales simuladas para Argentina (Figura 6-4) revela que los límites establecidos no son sobrepasados. Sin embargo, estos sí son sobrepasados en las ARF correspondientes a las ciudades más densamente pobladas, como Buenos Aires (ARF1), Córdoba (ARF2) y Rosario (ARF3) (Figura 6-4 – Panel derecho), donde la elevada densidad de tráfico vehicular y la actividad industrial en estas zonas, da lugar a concentraciones más elevadas de NO₂ en comparación con áreas rurales o menos urbanizadas (como ARF6, ARF7 y ARF8, Figura 6-4 – Panel izquierdo), donde los valores se mantienen dentro de los límites establecidos.

En cuanto a la variación estacional, al analizar las concentraciones promedio mensuales para NO₂ a nivel nacional, se observa un patrón donde las concentraciones aumentan de enero a julio, alcanzando su punto máximo en este último mes, y posteriormente presentan una disminución en octubre. Este comportamiento estacional se refleja también en las regiones Central, Pampa, Patagonia y Oeste (Figura 6-4 - Paneles superior e inferior). Sin embargo, en las regiones Noreste y Noroeste se evidencia un comportamiento bimodal, con picos de concentración en abril y julio, y mínimos en enero y octubre. Este patrón distinto puede estar influenciado por factores geográficos, climáticos y patrones de emisión específicos de esas regiones (Figura 6-4 - Panel superior).

Es importante destacar que las regiones Central y Pampa son las principales contribuyentes a las emisiones nacionales totales de NO₂, representando aproximadamente el 26% y el 38%,

respectivamente (ver Tabla 6-6). Por tanto, lo que ocurre en estas regiones desempeña un papel fundamental en la determinación de la estacionalidad de las concentraciones promedio del país. Adicionalmente, las ARF con las concentraciones simuladas más altas (Figura 6-4 - Panel derecho), correspondientes a los principales centros urbanos, se encuentran ubicadas en estas regiones (ARF1 (Pampa), ARF2 (Central) y ARF3 (Central)). Esto es particularmente relevante en el mes de julio donde se observa un incremento significativo en el porcentaje de contribución de las emisiones residenciales en estas ARF y que tiene repercusión en el total nacional (ver Figura 6-7e y Sección 6.3.4). Por otro lado, el ARF6 ubicada en la región Patagonia muestra las concentraciones promedio simuladas más elevadas entre las ARF no urbanas (Figura 6-4 - Panel izquierdo). En invierno, esta región experimenta un aumento de emisiones debido a las actividades de calefacción y un mayor consumo de electricidad, lo cual se refleja en concentraciones promedio más altas durante ese período.

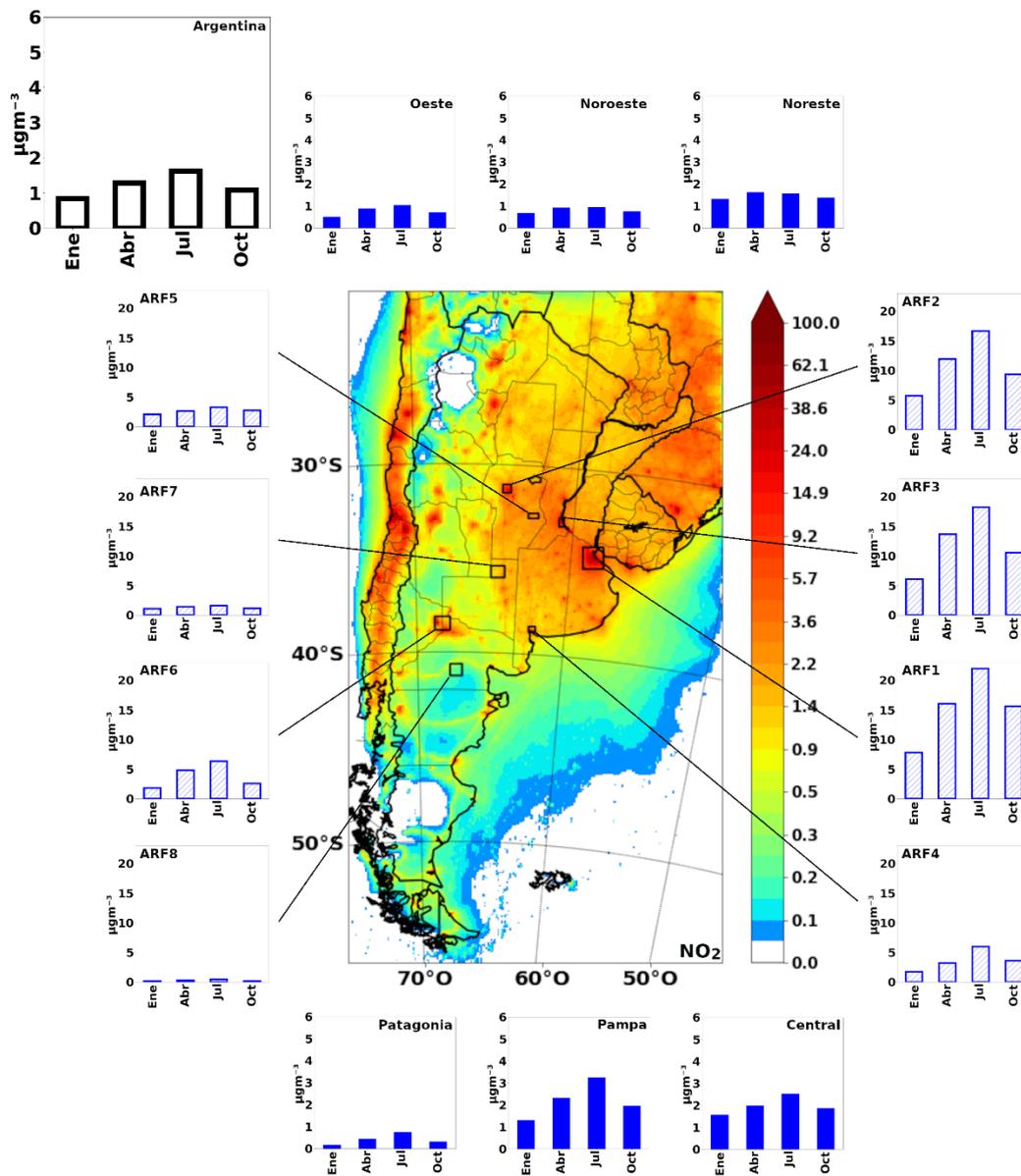


Figura 6-4. Distribución espacial de concentraciones medias anuales de NO_2 ($\mu\text{g m}^{-3}$) en superficie para la simulación de referencia (Total) restando la simulación ICBC. Los diagramas de barras representan las concentraciones medias mensuales para toda la Argentina (delineado negro), para las 6 regiones definidas en la Figura 6-1 (Central, Noreste, Noroeste, Oeste, Patagonia, f: Pampa) (color azul sólido) y para las áreas de referencia definidas en la sección 6.2.4 (ARF1: AMBA, ARF2: Córdoba, ARF3: Rosario, ARF4: Bahía Blanca, ARF5: Ruta 9, ARF6: Fuentes puntuales, ARF7: Cultivos, ARF8: Condiciones de Fondo) (delineado azul). (Elaboración propia)

6.3.3.2 Material Particulado (PM_{10} y $\text{PM}_{2.5}$)

En base a las normas internacionales expuestas en el Capítulo 4, el valor límite medio anual de PM_{10} es de $15 \mu\text{g m}^{-3}$, mientras que el de $\text{PM}_{2.5}$ es de $5 \mu\text{g m}^{-3}$. En el mapa de concentraciones presentado en la Figura 6-5 y la Figura 6-6 se puede observar que, dentro de los límites territoriales de Argentina, las concentraciones medias anuales en superficie de PM_{10} y $\text{PM}_{2.5}$ se mantienen por debajo de las directrices internacionales establecidas. A escala nacional, las concentraciones medias mensuales

simuladas muestran un pico en abril, seguido de un descenso gradual hasta enero, que representa el período de concentraciones más bajas (Figura 6-5 y Figura 6-6 – Panel superior).

Las zonas del mapa con mayores concentraciones superficiales de PM coinciden con las regiones Noreste, Central y Pampeana. En particular, la región Noreste exhibe los valores medios mensuales máximos en abril ($PM_{2.5}$: $4 \mu\text{g m}^{-3}$ y PM_{10} : $5.8 \mu\text{g m}^{-3}$), superando al menos en un factor de dos los promedios mensuales de las otras regiones. En las regiones Central, Noreste y Noroeste, las concentraciones simuladas siguen un patrón estacional similar a la media nacional, observándose un descenso desde abril hasta enero. Por el contrario, las regiones Pampeana y Patagónica (Figura 6-5 y Figura 6-6 – Panel inferior) muestran una tendencia creciente de enero a julio, alcanzando su máximo en julio para volver a descender gradualmente hasta octubre. Cabe mencionar que la Patagonia presenta consistentemente las concentraciones más bajas entre las regiones analizadas. Por último, la región Oeste presenta dos picos estacionales en abril y en octubre.

En las ARF urbanas (ARF1, ARF2, ARF3 y ARF4, Figura 6-5 y Figura 6-6 – Panel derecho), así como en las regiones caracterizadas por una alta densidad de fuentes de emisión como el tráfico de vehículos, las actividades industriales y la calefacción residencial, se obtuvieron niveles más altos en las concentraciones simuladas de PM_{10} y $PM_{2.5}$. Los valores medios mensuales más elevados de PM se observaron en el ARF1, con concentraciones de $PM_{2.5}$ de $0.9 \mu\text{g m}^{-3}$ en enero, $2.7 \mu\text{g m}^{-3}$ en abril, $3.3 \mu\text{g m}^{-3}$ en julio y $2.7 \mu\text{g m}^{-3}$ en octubre, así como concentraciones de PM_{10} de $1.3 \mu\text{g m}^{-3}$ en enero, $4.2 \mu\text{g m}^{-3}$ en abril, $5.6 \mu\text{g m}^{-3}$ en julio y $4.4 \mu\text{g m}^{-3}$ en octubre. Es relevante destacar que esta misma área fue seleccionada como objeto de estudio en el Capítulo 5, donde se pudo comprobar que, incluso al evaluar las concentraciones simuladas en un dominio de mayor resolución, no se excedieron los valores internacionales establecidos tanto para las medias anuales como para las de 24 horas. Sin embargo, es importante tener en cuenta que se pueden presentar ocasionalmente superaciones en las medias de una hora, especialmente durante los meses de invierno. Por otro lado, se observaron los valores más bajos en ARF8 ($<0.4 \mu\text{g m}^{-3} PM_{10}$ y $<0.3 \mu\text{g m}^{-3} PM_{2.5}$) y ARF6 ($<1.1 \mu\text{g m}^{-3} PM_{10}$ y $<0.8 \mu\text{g m}^{-3} PM_{2.5}$), ubicadas en la región Patagónica.

Por último, cabe señalar que el ARF5, que corresponde a la ruta, presentó concentraciones relativamente bajas de NO_2 (Figura 6-4 – Panel izquierdo). Sin embargo, los valores medios mensuales en superficie de PM para esta zona (Figura 6-5 y Figura 6-6 – Panel izquierdo) son comparables a los observados en las ARF urbanas, siendo particularmente similares a los valores registrados en ARF2 (ubicada dentro de la misma región) y exhiben un comportamiento estacional similar con un pico en abril. Este fenómeno sugiere que las partículas están siendo transportadas desde los centros urbanos y otras partes de la región hasta el ARF5. En particular, las partículas $PM_{2.5}$ tienden a ser transportadas a mayores distancias por las corrientes de aire en comparación con el NO_2 y las PM_{10} debido a su menor tamaño y a su capacidad para permanecer suspendidas en el aire durante largos periodos. En cambio,

el NO₂, al ser un gas, no se transporta a distancias tan largas como las partículas en suspensión (Atkinson, 2000; Seinfeld & Pandis, 2006).

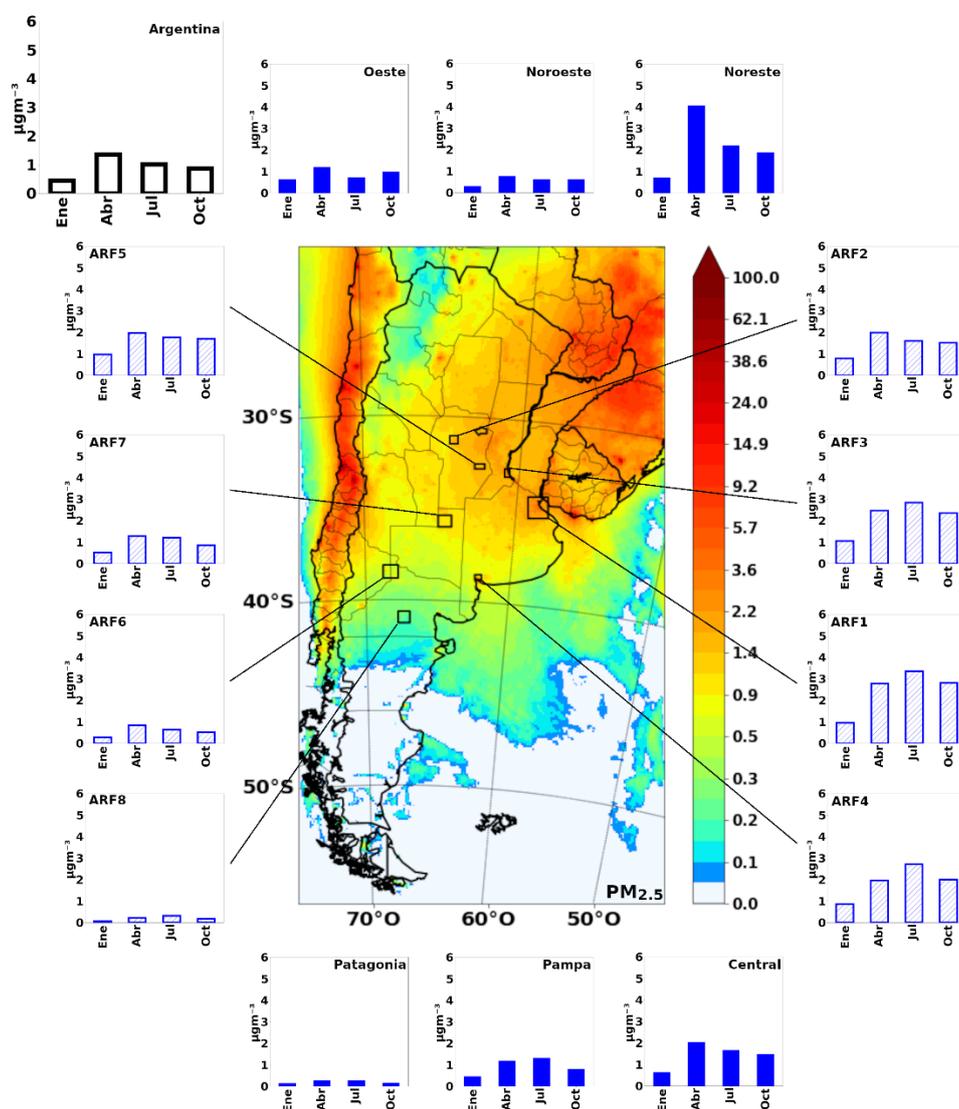


Figura 6-5. Distribución espacial para las concentraciones medias anuales de PM_{2.5} ($\mu\text{g m}^{-3}$) en superficie para la simulación de referencia (Total) restando la simulación ICBC. Los diagramas de barras representan las concentraciones medias mensuales para toda la Argentina (delineado negro), para las 6 regiones definidas en la Figura 6-1 (Central, Noreste, Noroeste, Oeste, Patagonia, f: Pampa) (color azul sólido) y para las áreas de referencia definidas en la Sección 6.2.4 (ARF1: AMBA, ARF2: Córdoba, ARF3: Rosario, ARF4: Bahía Blanca, ARF5: Ruta 9, ARF6: Fuentes puntuales, ARF7: Cultivos, ARF8: Condiciones de Fondo) (delineado azul). (Elaboración propia)

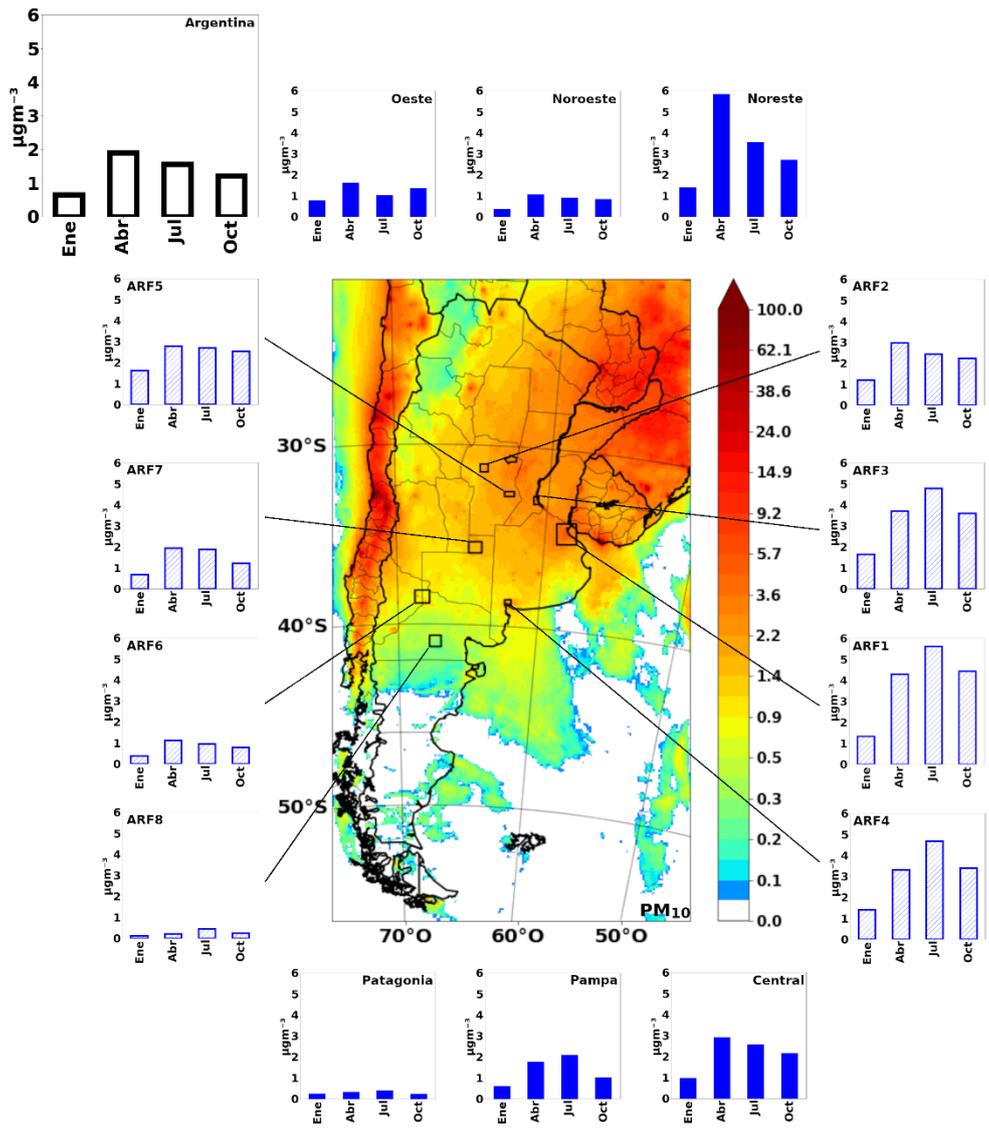


Figura 6-6. Distribución espacial para las concentraciones medias anuales de PM_{10} ($\mu g m^{-3}$) en superficie para la simulación de referencia (Total) restando la simulación ICBC. Los diagramas de barras representan las concentraciones medias mensuales para toda la Argentina (delineado negro), para las 6 regiones definidas en la Figura 6-1 (Central, Noroeste, Oeste, Patagonia, f: Pampa) (color azul solido) y para las áreas de referencia definidas en la sección 6.2.4 (ARF1: AMBA, ARF2: Córdoba, ARF3: Rosario, ARF4: Bahía Blanca, ARF5: Ruta 9, ARF6: Fuentes puntuales, ARF7: Cultivos, ARF8: Condiciones de Fondo) (delineado azul). (Elaboración propia)

6.3.4 Contribución estacional de los sectores de emisión

Los resultados obtenidos con las simulaciones de sensibilidad sectorial se utilizaron para cuantificar la contribución de las distintas fuentes de emisión a las concentraciones de $PM_{2.5}$, PM_{10} y NO_2 . La Figura 6-7 muestra la contribución sectorial a las emisiones mensuales totales (Panel izquierdo), así como las contribuciones porcentuales de cada sector (5 sectores) a las concentraciones medias mensuales simuladas (Panel derecho) en Argentina y en las diferentes regiones (6 regiones) para las cuatro

estaciones. La misma contribución sectorial se calculó para las emisiones y las concentraciones superficiales dentro de cada una de las áreas de referencia (Figura 6-8).

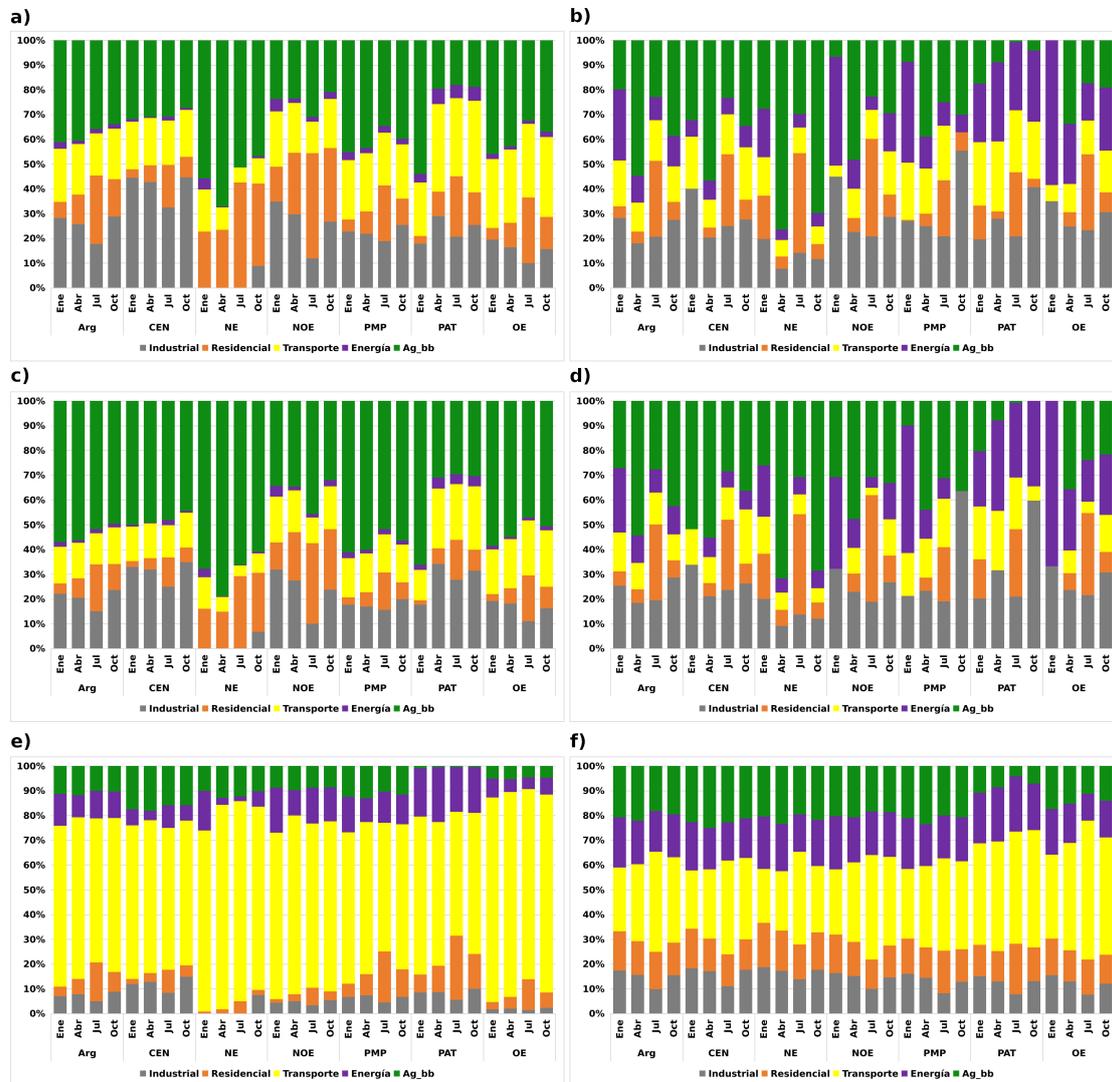


Figura 6-7. Porcentajes de contribución de los diferentes sectores a las emisiones totales mensuales (Panel izquierdo) y a las concentraciones promedio mensuales (Panel derecho) para PM_{2.5} (a y b), PM₁₀ (c y d) y NO₂ (e y f). Las barras de colores muestran la contribución sectorial para toda la Argentina (Arg) y para las 6 regiones definidas en la Figura 6-1 (CEN: Central, NE: Noreste, NOE: Noroeste, PMP: Pampa, PAT: Patagonia, OE: Oeste). (Elaboración propia)

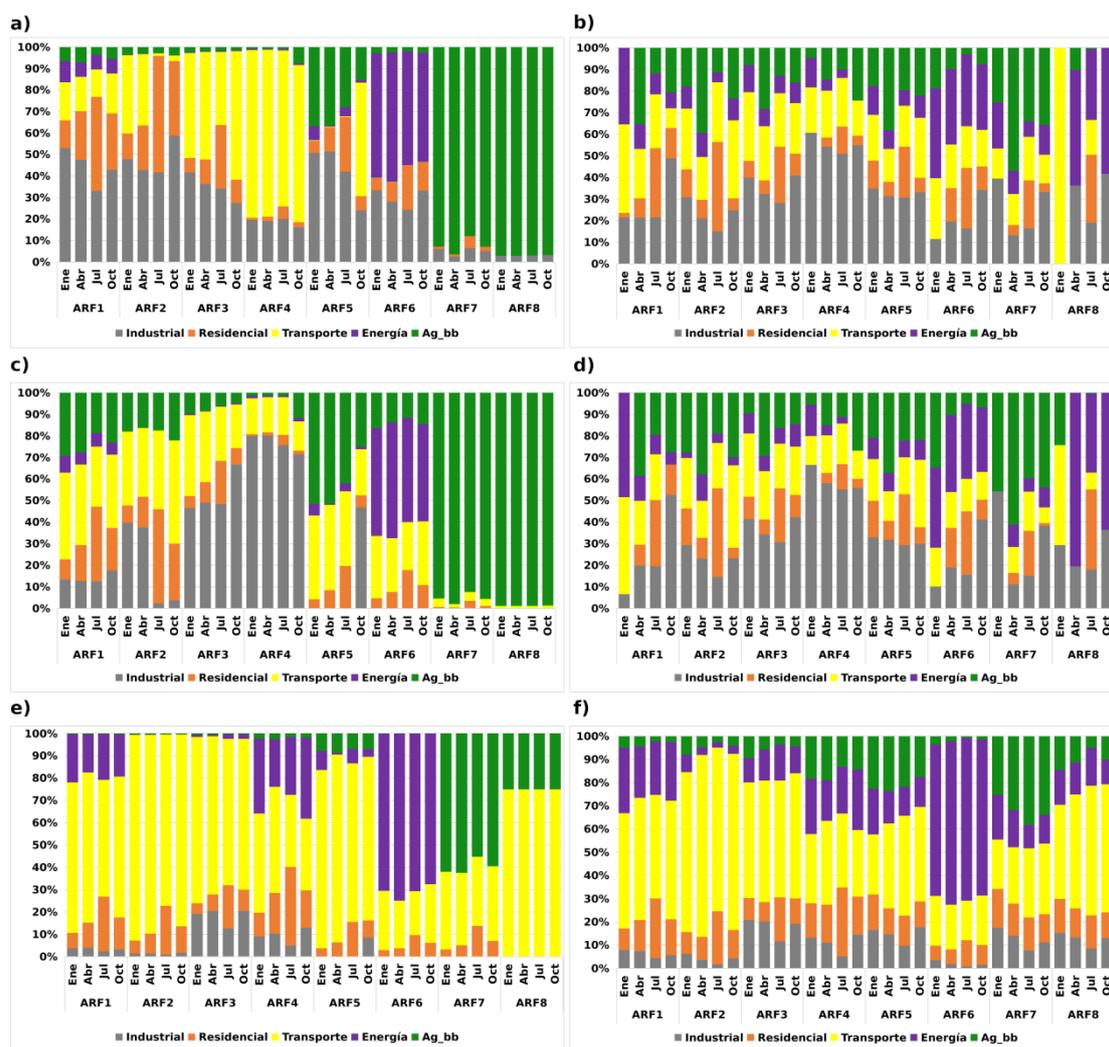


Figura 6-8. Porcentajes de contribución de los diferentes sectores a las emisiones totales mensuales (Panel izquierdo) y a las concentraciones promedio mensuales (Panel derecho) para $PM_{2.5}$ (a y b), PM_{10} (c y d) y NO_2 (e y f). Las barras de colores muestran la contribución sectorial para las áreas de referencia definidas en la sección 6.2.4 (ARF1: AMBA, ARF2: Córdoba, ARF3: Rosario, ARF4: Bahía Blanca, ARF5: Ruta 9, ARF6: Fuentes puntuales, ARF7: Cultivos, ARF8: Condiciones de Fondo). (Elaboración propia)

6.3.4.1 Dióxido de nitrógeno (NO_2)

Anualmente, el mayor contribuyente a las concentraciones de NO_2 fue el sector del transporte (33%), seguido de Ag_bb (20%) y energía (18%). La contribución del transporte a las concentraciones simuladas a nivel nacional es mayor durante el invierno (julio, 40%) y menor durante el verano (enero, 26%). El transporte es también el sector predominante en todas las regiones, y es relevante incluso en regiones con concentraciones mensuales promedio bajas como la Patagonia ($<1 \mu g m^{-3}$), donde su contribución relativa a las concentraciones simuladas en todos los meses fue superior al 41%. En la Figura 6-7e puede observarse que la contribución porcentual del sector transporte a las emisiones totales nacionales es

mucho mayor que la contribución de dicho sector en las concentraciones Figura 6-7f, pues al ser el transporte una fuente distribuida a lo largo de las rutas, el contaminante llega a dispersarse más, lo que resulta en una concentración media más baja. En el caso de los sectores Ag_bb y energía sucede el efecto contrario: pequeños cambios en las emisiones derivan en un porcentaje de contribución mayor en las concentraciones.

El segundo mayor contribuyente a las concentraciones varía en función de la región. En las regiones Central, Noreste y Pampeana, Ag_bb es responsable de más del 20% de las concentraciones, mientras que, en la Patagonia, el sector energético representa aproximadamente el 21%. En las regiones Noroeste y Oeste, tanto el Ag_bb como la energía contribuyen de forma similar a las concentraciones simuladas.

Un análisis espacial más detallado (Figura 6-8) muestra que, además de las diferencias regionales, el alto nivel de resolución del modelo y de los datos de entrada permiten simular la heterogeneidad espacial de las concentraciones, evidenciando variaciones significativas en las contribuciones de los sectores en diferentes áreas de referencia dentro de una misma región. Por ejemplo, dos de los centros urbanos analizados, Córdoba y Rosario, se ubican en la región Central. En Córdoba (ARF2), el sector residencial emerge como el segundo mayor contribuyente a las concentraciones, representando hasta un 23% (en julio). El aumento de las emisiones residenciales en julio se refleja fielmente en un aumento de las concentraciones medias. Sin embargo, en la región Central, la contribución porcentual del sector residencial a las emisiones varía entre 2 y 9%, con un máximo en julio, pero dicho sector apenas alcanza una contribución de 13% a las concentraciones en ese mes. La contribución es importante pero los cambios en las concentraciones son mucho menos significativos. En este caso, la variación estacional de las emisiones se ve compensada por los procesos de transporte regional. Por otro lado, en las concentraciones de Rosario (ARF3) resalta el sector industrial, con contribuciones mayores a 19% durante todo el año, excepto en julio donde el protagonismo lo toma de nuevo el sector residencial. Una tercera área de referencia se ubica también en esta región: Ruta 9 (ARF5). Esta área, al estar alejada de los centros urbanos, permite observar un comportamiento estacional y valores de concentración similares al del promedio de la región, siendo los sectores transporte y Ag_bb, los más importantes.

Las tres ARF seleccionadas dentro de la región Pampeana (ARF1, ARF4 y ARF7) también presentan patrones de concentración distintos entre ellas. Los centros urbanos AMBA (ARF1) y Bahía Blanca (ARF4) siguen un patrón estacional similar al del resto de la región. El sector del transporte es el principal contribuyente a las concentraciones en ambas localidades. El segundo lugar es ocupado por el sector energético en enero y octubre (ARF1: 25-28%, ARF4: 24-26%), mientras que en julio resalta el sector residencial con contribuciones de hasta 30%. Por otra parte, en el ARF7 (cultivos), que representa las fuentes de área rurales, se registran solamente emisiones provenientes de los sectores Ag_bb, transporte y residencial (Figura 6-8a). Estos sectores son importantes en la distribución porcentual de

las concentraciones, siendo Ag_bb el que contribuye en mayor proporción con un 25-38%, seguido del transporte con un 21-30%. Sin embargo, es evidente que la zona está influenciada por las emisiones de otros sectores, que se transportan desde fuentes cercanas. Por ejemplo, en enero, la contribución porcentual de Ag_bb a las concentraciones disminuye entre un 7% y un 13% en comparación con otros meses, a pesar de que las emisiones de este sector no disminuyen ni aumentan las emisiones de otros sectores en la misma ARF7. Como se muestra en la Tabla 6-8, las emisiones de los sectores industrial y energético son nulas, y las emisiones del sector residencial ($0.35\text{-}1.62 \text{ Mg mes}^{-1}$) son bajas en comparación con las de Ag_bb (aproximadamente 6 Mg mes^{-1}), por lo que un porcentaje de las concentraciones simuladas en la zona de cultivos está siendo transportado desde las regiones circundantes.

Finalmente, en la región patagónica, dos zonas rurales, ARF6 y ARF8, presentan características contrastantes a pesar de su proximidad (Figura 6-1). La influencia local de las emisiones en las concentraciones de estas zonas varía considerablemente en comparación con el comportamiento general de la región. La ARF6, caracterizada por fuentes puntuales, exhibe aportes significativos del sector energético, representando más del 65% de las concentraciones a lo largo del año, seguido por el sector transporte (aprox. 20%), lo cual es consistente con el comportamiento de las emisiones. En contraste, ARF8 exhibe condiciones de fondo, con concentraciones mucho más bajas comparadas con otras zonas. Las contribuciones de las emisiones en esta zona provienen principalmente del transporte (67%) y Ag_bb (23%). Si bien en las concentraciones, el sector transporte sigue teniendo el mayor aporte, con una contribución media del 50%, los otros sectores, como el residencial (13%), el industrial (13%), el energético (14%), presentan contribuciones medias similares a las del sector Ag_bb (10%). Es importante señalar que esta zona no tiene emisiones de dichos sectores (residencial, industrial, energético), y el aumento observado en las concentraciones está influenciado por las emisiones de las regiones circundantes, principalmente en julio.

6.3.4.2 Material Particulado (PM_{10} y $\text{PM}_{2.5}$)

A diferencia de NO_2 , las especies de aerosoles mostraron mayores variaciones en las contribuciones de los distintos sectores, entre regiones y meses. Además, como se demostró en la Sección 6.3.2, las ICBC desempeñan un papel crucial en la simulación de PM_{10} y $\text{PM}_{2.5}$ las IC/BC, con el fin de evitar introducir una influencia estacional por parte de las IC/BC en el análisis presentado (tanto para PM como para NO_2), se realizó la resta descrita en la Sección 6.3.2.

A escala anual, Ag_bb es la principal fuente de $\text{PM}_{2.5}$ y PM_{10} , con una contribución del 34 y 38% a la concentración media nacional respectivamente, seguida de las actividades industriales (24 y 23%) y energía (15 y 14%). En general, tanto en las emisiones como en las concentraciones de PM_{10} , el principal

sector contribuyente es Ag_bb para todos los meses, excepto en julio, donde la contribución del sector residencial a las emisiones es entre 2 y 4 veces superior al resto de los meses, lo que se refleja en un aumento de hasta 5 veces en la contribución del sector residencial a las concentraciones. En el caso de PM_{2.5}, en la Figura 6-7a se muestra que el sector Ag_bb es el que más contribuye a las emisiones a nivel nacional. Sin embargo, en las concentraciones (Figura 6-7b) se observa que, si bien en abril y octubre Ag_bb sigue siendo importante (>40%), en enero los sectores industrial (28%) y energía (29%) presentan las mayores contribuciones porcentuales, mientras que en julio, el sector residencial realiza las mayores contribuciones (31%). El sector industrial resalta a nivel regional/nacional, particularmente en octubre, donde tuvo las mayores contribuciones para las regiones Pampeana, Patagónica y Oeste (PM₁₀: 30-64% y PM_{2.5}: 31-55%) y mostró ser mucho más relevante a nivel local, por ejemplo, en las ARF3 (Rosario) y ARF4 (Bahía Blanca) donde fue el principal contribuyente durante todo el año.

En las regiones Noreste, Noroeste y Central, el sector Ag_bb tiene las mayores contribuciones para PM_{2.5} y PM₁₀ simuladas en abril (CEN:~55%, NOE:~48%, NE:~70%) y octubre (CEN:~35%, NOE:~30%, NE:~70%), lo cual se debe principalmente a la influencia de las emisiones asociadas a la quema de residuos de cultivos y a la tala de bosques para la agricultura en el norte, y a los incendios asociados a praderas y pastos secos en la zona central. También se observa un aumento de la contribución del sector Ag_bb a las concentraciones de PM en las regiones ARF1, ARF2 y ARF3, que representan grandes centros urbanos. En abril, el sector Ag_bb se convirtió en el contribuyente más importante a las concentraciones tanto de PM₁₀ como de PM_{2.5} en ARF1 (35-38%) y ARF2 (38-39%), y en el segundo contribuyente más importante en ARF3 (28-29%). El sector Ag_bb tiene incluso un impacto significativo en ARF5, donde también alcanza su mayor contribución en abril (37-38%).

Las emisiones del sector residencial, tanto a nivel nacional como regional, tienen un ciclo estacional muy marcado, presentando máximos en julio, debido sobre todo al uso de gas natural y biocombustibles para la calefacción doméstica en la estación fría (Puliafito et al., 2021). Las concentraciones simuladas de PM_{2.5} siguen este comportamiento, mostrando a las actividades residenciales como el principal contribuyente en el mes de julio, tanto a nivel nacional (31%) como en las regiones Noreste (40%), Oeste (31%), Noroeste (39%) y Central (29%). Sin embargo, en las regiones Pampeana y Patagónica, Ag_bb (25%) y energía (27%), respectivamente, tuvieron los mayores aportes a las concentraciones en este mes. Por su parte, PM₁₀ muestra un comportamiento similar al de PM_{2.5} a nivel nacional y en las distintas regiones, con un notable aumento de los aportes del sector residencial en julio en las regiones Noreste (41%), Oeste (33%) y Noroeste (43%), comparado con el resto de los meses donde el aporte fue menor a 18%, dicho aumento se debe a que en las regiones más al Norte la calefacción se realiza con GLP y leña, ya que no hay red de gas natural. En la región Central, a pesar de apreciarse un aumento de las contribuciones del sector residencial a las concentraciones de PM₁₀ respecto del resto de meses, el sector Ag_bb sigue teniendo una contribución mayor. En los meses de

enero, abril y octubre el sector residencial es, en general, el que presenta los menores porcentajes de contribución, comparado con los demás sectores. El comportamiento del sector residencial también se refleja en todas las ARF, las cuales mostraron mayores contribuciones de este sector en las concentraciones de julio, incluso en aquellas zonas que representan entornos rurales.

En el ARF8 (Condiciones de fondo) se observaron las concentraciones más bajas de todas las ARF ($<0.4 \mu\text{g m}^{-3}$) (Figura 6-5 - Panel izquierdo) con influencia de diversos sectores, como energía, transporte, residencial e industrial. A pesar de que casi el 100% de las emisiones reportadas en esta zona proceden del sector Ag_bb, las concentraciones de $\text{PM}_{2.5}$ están influenciadas principalmente por el sector energético a lo largo del año (abril 53%, julio 33%, oct 58%), aunque el sector industrial es un contribuyente significativo en abril (36%) y octubre (42%), y el sector residencial experimentan un aumento considerable en julio (32%), mientras que en enero todas las concentraciones vienen del sector transporte. En cuanto a PM_{10} , la energía y la industria son las principales fuentes en abril y octubre (energía 81% y 63%, industria 19% y 37%), mientras que el transporte y el sector residencial destacan en enero (46%) y julio (37%) respectivamente. Por otra parte, el ARF6, se caracteriza por un alto porcentaje de emisiones provenientes de fuentes puntuales ($>45\%$), lo cual se refleja en el patrón de concentración simulado. En esta ARF el sector energético destaca como el principal contribuyente en las concentraciones simuladas, representando más del 33% a lo largo de todo el año con un pico máximo en enero ($\text{PM}_{2.5}$: 42%, PM_{10} : 37%). Además del sector energético, el sector industrial también contribuye significativamente tanto a las concentraciones promedio de PM_{10} como a las $\text{PM}_{2.5}$ en esta zona, aunque no tiene una contribución a las emisiones de PM_{10} .

6.4 Conclusiones parciales

En este capítulo se utilizó el sistema de modelado completo WRF-Chem-KPP en combinación con la configuración regional optimizada y datos de entrada obtenidos del inventario GEAA-AEI, cuya alta resolución espacio-temporal ha demostrado tener una influencia positiva en el desempeño del modelo a escala sub-regional (Capítulo 5). Se evaluaron las características de variación estacional y espacial de la contaminación atmosférica en el mes central de cada estación del año (enero, abril, julio y octubre) de 2019 en comparación con la columna de NO_2 de TROPOMI. Las columnas de NO_2 troposférico de WRF-Chem y TROPOMI muestran buenas correlaciones espaciales y temporales en todo el dominio con coeficientes de correlación de hasta 0.84 y un sesgo medio normalizado entre -2% y 80% que depende fuertemente del periodo del año considerado. WRF-Chem reproduce espacialmente las columnas troposféricas de NO_2 sobre fuentes puntuales aisladas (ARF6) y regiones urbanas con correlaciones entre 0.48 y 0.90, pero presenta correlaciones espaciales menores sobre las áreas de referencia de

condiciones de fondo (ARF8) y de cultivos (ARF7). El comportamiento espacio-temporal de las emisiones se ve reflejado en el modelo y está en concordancia con lo mostrado por el satélite principalmente para las plumas ubicadas sobre los centros urbanos. Sin embargo, el modelo tiende a sobreestimar los valores absolutos de columnas sobre las áreas más contaminadas principalmente en invierno (julio).

El estudio de sensibilidad considerando los sectores de emisión independientes, muestra que la contribución de los distintos sectores varía entre las regiones y dentro de ellas, y que los aportes dependen en gran medida de la especie considerada. En el análisis se encontró que para NO₂ el transporte y la producción de energía son los sectores que más influyen en las concentraciones simuladas, mientras que para PM la quema de biomasa (Ag_bb) y el sector industrial son los que más destacan, por lo que reducir las emisiones de estos sectores debería ser una prioridad en los esfuerzos de control de la contaminación atmosférica en Argentina. Además, es importante prestar mucha atención a las fuentes puntuales, ya que se observó que cambios pequeños en las emisiones pueden tener un efecto amplificado en las concentraciones medias, especialmente en el caso de aerosoles. Los resultados presentados en este capítulo constituyen un punto de partida para que los responsables políticos y las partes interesadas desarrollen estrategias y políticas específicas para cada región con el fin de mejorar la calidad del aire. En este sentido, las propuestas de futuras medidas de control de la contaminación podrían incluir la promoción del uso de modos de transporte más limpios, el fomento de la eficiencia energética y las energías renovables, el control de las emisiones por quema de biomasa y la promoción del uso de fuentes de energía domésticas más limpias. Se destaca la importancia del análisis de sensibilidad de las simulaciones con un enfoque sectorial, ya que no solo se evidencia el comportamiento de las emisiones y los sectores predominantes, sino que se identifica la influencia de sectores sobre las concentraciones en zonas remotas o en zonas donde las emisiones locales ni siquiera incluyen un sector determinado. Identificar el comportamiento del modelo según los diferentes sectores es la primera base para definir estrategias de mitigación. Se enfatiza la importancia de la obtención de información acerca de las concentraciones a nivel local, ya que como se ha demostrado, la dinámica espacio-temporal de las concentraciones puede ser totalmente diferente para área de referencia más pequeñas dentro de una misma región. Además, disponer de estos datos en alta resolución, conociendo tanto los impactos de un sector a nivel regional como local, posibilita la realización de estrategias de mitigación regionalmente integradas. Finalmente es importante señalar que el análisis realizado puede dar una idea de los efectos que tienen las emisiones de los distintos sectores en las concentraciones simuladas, pero se trata de un método de sensibilidad que puede presentar incertidumbres en cuanto a la contribución porcentual de cada fuente dentro de un sistema no lineal, ya que la suma de los impactos de todas las fuentes no es exactamente igual a la concentración total (Yarwood et al., 2007) .

7 Conclusiones y trabajo futuro

7.1 Conclusiones generales y consideraciones finales

La investigación realizada en esta tesis ha logrado importantes avances en el desarrollo y mejora del sistema de modelado WRF-Chem-KPP para la comprensión de la calidad del aire y la química atmosférica en Argentina. La metodología desarrollada en los Capítulos 2 y 3 permite la utilización simultánea de inventarios de emisiones globales y/o locales con diversas resoluciones espacio-temporales, lo que resulta de gran utilidad para realizar análisis comparativos de diferentes escenarios. Además, se ha implementado operativamente el modelo WRF-Chem-KPP para realizar el modelado 3D+temporal de la química troposférica de manera local (Capítulo 5) y regional (Capítulo 6), adaptando diferentes bases de datos en alta resolución preexistentes para el área de estudio, lo que mejora ampliamente la configuración por defecto de WRF-Chem.

La investigación ha cumplido con los objetivos específicos establecidos, incluyendo la incorporación de distintos tipos de mecanismos de reacción atmosféricos validados en WRF-Chem, para lo cual hubo que adaptar la especiación química de los inventarios de emisión locales de manera tal que sean compatibles con los incluidos previamente en el modelo, y de este modo obtener una detallada descripción de las fuentes de emisión. Se han creado diferentes herramientas informáticas y códigos para el preprocesamiento y postprocesamiento de datos, los cuales optimizan el rendimiento y exactitud de las simulaciones. En un sentido técnico, la tesis ha logrado un gran aporte al campo de la simulación de la contaminación atmosférica al dejar un modelo completamente configurado y funcional que incorpora avances tecnológicos significativos con información local. Los resultados obtenidos y la metodología empleada permiten un enfoque más preciso y eficiente en la investigación de diferentes preguntas científicas relacionadas con la calidad del aire y la química atmosférica. La herramienta desarrollada queda a disposición de la comunidad científica para ser utilizada en investigaciones futuras y contribuir al avance del conocimiento en este campo de estudio.

Cabe destacar que las investigaciones previas realizadas por el grupo GEAA con el modelo WRF-Chem, se centraron en la identificación de configuraciones químicas y meteorológicas óptimas para la zona de estudio. Sin embargo, estos análisis se limitaban a la versión básica del modelo WRF-Chem y el uso únicamente de inventarios de emisión globales, ya que hasta antes de la presente tesis no se había implementado una configuración completa WRF-Chem-KPP. Dicho avance ha permitido la utilización de esquemas químicos más complejos y/o la personalización de los esquemas existentes para incorporar reacciones químicas adicionales. Esta mejora posibilita la realización de investigaciones relacionadas con la formación y transporte de contaminantes secundarios como el ozono troposférico

y el material particulado, aspectos que no pueden ser abordados a través de la información exclusivamente proporcionada por un inventario de emisiones. Adicionalmente, el avance sobre la incorporación simultánea de inventarios de emisiones con distintas resoluciones espacio-temporales dentro del modelo ha puesto de manifiesto la influencia sustancial de las variaciones espaciales y temporales de las emisiones antropogénicas sobre las simulaciones de la calidad del aire. Esto resalta la importancia de disponer de información precisa sobre la distribución espacial y el comportamiento diurno de las fuentes de contaminación. Por otra parte, gracias a la implementación de la configuración completa en el centro de computación de alto rendimiento (TOKO), se han adquirido diversos conocimientos sobre la eficiencia computacional de los procesos internos del modelo. Dicho conocimiento ha permitido llevar a cabo simulaciones más complejas y prolongadas en el tiempo, como se evidencia en los casos de estudio (Capítulos 5 y 6). Antes de los desarrollos expuestos en este estudio, tales simulaciones habrían implicado una demanda de tiempo considerable o incluso habrían sido inviables debido a las limitaciones de los recursos computacionales. Además, es importante destacar que no se había realizado ningún análisis de rendimiento en el clúster TOKO para el modelo WRF-Chem previo a este estudio. Como fruto de este desarrollo, el ámbito de investigación del grupo se ha ampliado para abarcar una comprensión más profunda de la capacidad oxidativa atmosférica y del impacto de las emisiones en la calidad del aire de la región.

En el Capítulo 5 se evaluó el desempeño del modelo utilizando inventarios de emisiones antropogénicas globales (EDGAR-HTAP) y locales (GEAA-AEI) con diferentes resoluciones espaciales y temporales. Para ello se realizó una comparación sobre Buenos Aires con las mediciones disponibles en superficie de concentraciones de PM_{10} , $PM_{2.5}$, NO_2 y O_3 , así como con la columna de NO_2 troposférico medida desde satélite, tomando como caso de estudio el periodo mayo-junio de 2018. Se encontró un buen desempeño general del modelo para todas las simulaciones dentro del dominio interno de mayor resolución (d03, 1.3 km). Las diferencias entre GEAA-AEI y EDGAR-HTAP dieron lugar a importantes variaciones en las distribuciones espaciales de las concentraciones y las frecuencias de distribución superficiales simuladas para todos los contaminantes, mas no en el promedio mensual de la columna de NO_2 troposférico. Se observó que cuando las emisiones son altas y se aglomeran dentro del centro de CABA (EDGAR-HTAP), el modelo responde de la misma manera, manteniendo una pluma contaminante grande y homogénea que se diluye hacia las áreas suburbanas (EDGARnp). Sin embargo, cuando el inventario incluye una alta resolución espacial (GEAA-AEI), la distribución de las plumas contaminantes en superficie distingue puntos críticos locales y características espaciales que se correlacionan con las fuentes de emisión puntuales y las autopistas (GEAAnp). Además, incluso cuando la variación diurna de las concentraciones de NO_2 ha sido adecuadamente representada en todas las simulaciones, los niveles de fondo nocturnos mejoran cuando se considera un perfil horario más definido con emisiones reducidas durante la noche (GEAAprf). Todo lo anterior confirma que el aumento de la resolución espacio-temporal del inventario de emisiones puede desempeñar un papel

clave en la representación de la calidad del aire modelada a escala regional: cuanto más fina es la resolución espacial del dominio estudiado, mayor es la variabilidad local y regional en los patrones de dispersión que se consigue.

Los resultados mostraron que el uso de una configuración local optimizada dentro de WRF-Chem-KPP ayuda a representar mejor la heterogeneidad espacial dentro de un gran centro urbano como la megaciudad del AMBA. La distinción entre puntos críticos individuales y áreas poco contaminadas es de primordial importancia para determinar la ubicación óptima de una estación de calidad del aire, dependiendo del objetivo de monitoreo. Así, en base a la aplicación del nuevo sistema WRF-Chem-KPP incluyendo el inventario GEAA-AEI en alta resolución, sugerimos diferentes ubicaciones donde podrían realizarse campañas de medición dentro del AMBA (o reubicar temporalmente las estaciones de monitoreo actuales). Esto posibilitaría por un lado optimizar el funcionamiento de la red de monitoreo de CABA dando información que resalte la variabilidad espacial de los contaminantes en distintos puntos de la ciudad; y por otro lado confirmar la exactitud del inventario nacional argentino a escala regional, propiciando su aplicación para posteriores estudios en otras ciudades del país.

En el Capítulo 6, se utilizó el sistema de modelado WRF-Chem-KPP en combinación con un inventario de emisiones antropogénicas local de alta resolución (GEAA-AEI) y otro global (EDGARv5) para analizar la contaminación atmosférica en un único dominio regional centrado en Argentina durante las cuatro estaciones del año 2019. Se examinaron las características espacio-temporales de las concentraciones atmosféricas simuladas y se evaluó el desempeño general del modelo, comparando los resultados con los datos de la columna troposférica de TROPOMI. Además, se analizaron las variaciones estacionales de las concentraciones simuladas en todo el país, tanto en áreas de referencia urbanas como en regiones más remotas. Se demostró la viabilidad de evaluar regionalmente la relación entre las concentraciones de contaminantes y los cambios en las emisiones antropogénicas en Argentina, aprovechando la disponibilidad de datos detallados del inventario GEAA-AEI con alta resolución espacial y temporal para identificar los sectores económicos que contribuyen en mayor medida a las emisiones atmosféricas en cada zona de estudio. Se proporciona información detallada sobre la contaminación atmosférica relacionada con PM_{10} , $PM_{2.5}$ y NO_2 en diversas regiones del país, identificando los sectores económicos con mayores emisiones y evaluando su impacto en la calidad del aire a nivel nacional y estacional. En líneas generales, se encontró una buena correlación entre las mediciones de NO_2 de TROPOMI y las simulaciones de WRF-Chem, aunque hubo una sobreestimación en las áreas más contaminadas durante el invierno. El estudio de sensibilidad reveló que el transporte y la producción de energía son los principales contribuyentes a las concentraciones de NO_2 , mientras que la quema de biomasa y el sector industrial son los principales factores en las concentraciones de PM. Asimismo, se encontró una fuerte dependencia estacional del material particulado con las

condiciones iniciales y de contorno utilizadas en el modelo, en particular el transporte de PM_{10} y $PM_{2.5}$ proveniente de Brasil.

Este estudio no solo actualiza el estado del arte en investigaciones sobre calidad del aire a nivel regional en Argentina, sino que también proporciona nueva información y conocimientos valiosos en un país que requiere iniciativas relacionadas con la caracterización de fuentes de contaminación atmosférica. Asimismo, la información satelital utilizada resultó ser muy valiosa a la hora de evaluar el rendimiento del modelo para determinados contaminantes, lo cual es de suma importancia en países subdesarrollados o en vías de desarrollo, donde no siempre se dispone de programas continuos de calidad del aire y/o las redes existentes no permiten una representación espacial adecuada. Esta tesis demuestra que las mediciones de NO_2 que realiza el satélite TROPOMI proporcionan información adecuada para realizar una validación del modelo WRF-Chem a escala regional en Argentina.

Finalmente, los resultados obtenidos ponen de manifiesto que el uso de información local en alta resolución y dependiente del tiempo tiene importantes implicaciones para abordar la distribución espacio-temporal tan variable de la calidad del aire simulada en Argentina tanto a nivel local como regional. También se señala el potencial de los modelos atmosféricos para ser utilizados en el diseño y optimización de las redes de monitoreo local, lo que a su vez puede promover una mejor comprensión de la calidad del aire regional, reduciendo al mismo tiempo los costos económicos y logísticos. Se concluye que el desarrollo y la mejora de los inventarios locales de emisiones en combinación con los modelos de calidad del aire de alta resolución es particularmente crucial en las ciudades sudamericanas subdesarrolladas/en desarrollo que carecen de una red integral de calidad del aire. Cabe mencionar que en un principio la metodología de la tesis fue planteada para incluir información de alta resolución en el modelo a escala continental, incluyendo todo el cono sur sudamericano. Sin embargo, dadas las dificultades ocasionadas por la situación de pandemia COVID-19, la interacción con otros países de la zona para obtener este tipo de información se vio limitada, por lo que fue necesario restringir el caso de estudio regional al territorio argentino. No obstante, los procedimientos planteados son suficientemente generales para extenderse a otras regiones, siempre y cuando la información requerida en alta resolución se encuentre disponible.

7.2 Trabajo futuro

En este trabajo se describieron los procedimientos metodológicos para implementar una configuración local optimizada en el modelado regional de la calidad de aire en Argentina utilizando el modelo WRF-Chem. Se realizaron las respectivas pruebas de validación del modelo, que dan confianza al uso del sistema WRF-Chem-KPP para analizar los impactos de diferentes fuentes de emisión sobre la variabilidad espacial y temporal de las especies químicas simuladas sobre regiones urbanas y rurales

del territorio argentino, así como la estacionalidad promedio de todo el territorio nacional. A continuación, se presentan algunas perspectivas interesantes que pueden ser investigadas a futuro, dando continuidad al trabajo de investigación presentado en esta tesis:

- El desafío de mitigar la contaminación atmosférica es global y exige una comprensión exhaustiva de los factores que influyen en la dinámica de los contaminantes. Por consiguiente, se requiere abordar este problema en una perspectiva que no solo considere el ámbito local, sino también el regional y global. Una estrategia viable para conseguir este objetivo es realizar simulaciones para toda América del Sur mediante la colaboración con grupos de investigación de otros países de la región, con el fin de integrar inventarios de emisiones de alta resolución en WRF-Chem. De esta manera, se logrará una aproximación más completa y precisa para la investigación de la contaminación transfronteriza y su impacto en la escala regional.
- Es fundamental realizar estudios de sensibilidad que vayan más allá del análisis de las observaciones para evaluar las estrategias de control de las emisiones. En este sentido, se propone la realización de estudios basados en el inventario de emisiones y en los resultados de simulaciones que tengan en cuenta la relación entre la calidad del aire y el desarrollo socioeconómico y productivo de cada región. Con el objetivo de analizar las implicaciones de la reducción de emisiones generadas por diferentes actividades, para proponer medidas de control específicas que permitan mejorar la calidad del aire en Argentina, principalmente en aquellas regiones que se encuentren más contaminadas. De esta manera, se proporcionaría una base científica que servirá de orientación para definir las políticas, la prevención y el control de la contaminación atmosférica en la región.
- La quema de biomasa, como la quema de bosques, praderas o cultivos puede tener un efecto significativo sobre la formación de nubes y el clima. Partiendo de una configuración local optimizada, investigar el efecto de distintos esquemas de aerosoles en la simulación regional de la calidad del aire, incluyendo aquellos que tienen en cuenta la interacción de los aerosoles producidos por las emisiones con la formación de nubes a través de la generación de núcleos de condensación. Esto permitirá contribuir a comprender el impacto de dichas emisiones en los regímenes de precipitación en Argentina, así como los cambios en dichos regímenes introducidos por la actividad humana.
- Las emisiones oceánicas pueden tener un impacto significativo sobre los cambios en las propiedades de los aerosoles, la microfísica de las nubes y el forzamiento radiativo. En este sentido, resulta de particular interés investigar los efectos de la inclusión de estas emisiones en las simulaciones realizadas con la configuración local optimizada para Argentina, principalmente identificando el efecto que pueden tener al interactuar con la contaminación proveniente de los grandes centros urbanos cercanos a la costa.

8 Referencias

- Achad, M., López, M. L., Ceppi, S., Palancar, G. G., Tirao, G., & Toselli, B. M. (2014). Assessment of fine and sub-micrometer aerosols at an urban environment of Argentina. *Atmospheric Environment*, *92*, 522–532. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.05.001>
- Ackermann, I. J., Hass, H., Memmesheimer, M., Ebel, A., Binkowski, F. S., & Shankar, U. (1998). Modal aerosol dynamics model for Europe. *Atmospheric Environment*, *32*(17), 2981–2999. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(98\)00006-5](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(98)00006-5)
- Álamos, N., Huneus, N., Opazo, M., Osses, M., Puja, S., Pantoja, N., Denier van der Gon, H., Schueftan, A., Reyes, R., & Calvo, R. (2022). High-resolution inventory of atmospheric emissions from transport, industrial, energy, mining and residential activities in Chile. *Earth System Science Data*, *14*(1), 361–379. <https://doi.org/10.5194/essd-14-361-2022>
- Allende, D. G., Cremades, P., Puliafito, S. E., Fernández, R., & Perez Gunella, F. (2010). Estimación de un factor de riesgo de exposición a la contaminación urbana para la población de la ciudad de Buenos Aires. *Avances En Energías Renovables y Medio Ambiente*, *14*. <http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/99351>
- Alonso, M. F., Longo, K. M., Freitas, S. R., Mello da Fonseca, R., Marécal, V., Pirre, M., & Klenner, L. G. (2010). An urban emissions inventory for South America and its application in numerical modeling of atmospheric chemical composition at local and regional scales. *Atmospheric Environment*, *44*(39), 5072–5083. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.09.013>
- Amann, M., Bertok, I., Borken-Kleefeld, J., Cofala, J., Heyes, C., Höglund-Isaksson, L., Klimont, Z., Nguyen, B., Posch, M., Rafaj, P., Sandler, R., Schöpp, W., Wagner, F., & Winiwarter, W. (2011). Cost-effective control of air quality and greenhouse gases in Europe: Modeling and policy applications. *Environmental Modelling & Software*, *26*(12), 1489–1501. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2011.07.012>
- Amnuaylojaroen, T., Barth, M. C., Emmons, L. K., Carmichael, G. R., Kreasuwun, J., Prasitwattanaseree, S., & Chantara, S. (2014). Effect of different emission inventories on modeled ozone and carbon monoxide in Southeast Asia. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *14*(23), 12983–13012. <https://doi.org/10.5194/acp-14-12983-2014>
- Arino, O., Ramos, J., Kalogirou, V., Defoumy, P., & Achard, F. (2012). Global Land Cover Map for 2009 (GlobCover 2009). *European Space Agency (ESA) & Université Catholique de Louvain (UCL), PANGAEA*, Art. 2009. <https://doi.org/10.1594/PANGAEA.787668>
- Arkouli, M., Ulke, A. G., Endlicher, W., Baumbach, G., Schultz, E., Vogt, U., Müller, M., Dawidowski, L., Faggi, A., Wolf-Benning, U., & Scheffknecht, G. (2010). Distribution and temporal behavior of particulate matter over the urban area of Buenos Aires. *Atmospheric Pollution Research*, *1*(1), 1–8. <https://doi.org/10.5094/APR.2010.001>
- Atkinson, R. (2000). Atmospheric chemistry of VOCs and NOx. *Atmospheric Environment*, *34*(12–14), 2063–2101. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(99\)00460-4](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(99)00460-4)

- Badia, A., Reeves, C. E., Baker, A. R., Saiz-Lopez, A., Volkamer, R., Koenig, T. K., Apel, E. C., Hornbrook, R. S., Carpenter, L. J., Andrews, S. J., Sherwen, T., & von Glasow, R. (2019). Importance of reactive halogens in the tropical marine atmosphere: a regional modelling study using WRF-Chem. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *19*(5), 3161–3189. <https://doi.org/10.5194/acp-19-3161-2019>
- Baklanov, A., Schlünzen, K., Suppan, P., Baldasano, J., Brunner, D., Aksoyoglu, S., Carmichael, G., Douros, J., Flemming, J., Forkel, R., Galmarini, S., Gauss, M., Grell, G., Hirtl, M., Joffre, S., Jorba, O., Kaas, E., Kaasik, M., Kallos, G., ... Zhang, Y. (2014). Online coupled regional meteorology chemistry models in Europe: current status and prospects. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *14*(1), 317–398. <https://doi.org/10.5194/acp-14-317-2014>
- Bates, K. H., & Jacob, D. J. (2019). A new model mechanism for atmospheric oxidation of isoprene: global effects on oxidants, nitrogen oxides, organic products, and secondary organic aerosol. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *19*(14), 9613–9640. <https://doi.org/10.5194/acp-19-9613-2019>
- Bogo, H. (1999). Continuous measurement of gaseous pollutants in Buenos Aires city. *Atmospheric Environment*, *33*(16), 2587–2598. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(98\)00270-2](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(98)00270-2)
- Bogo, H., Otero, M., Castro, P., Ozafrán, M. J., Kreiner, A., Calvo, E. J., & Negri, R. M. (2003). Study of atmospheric particulate matter in Buenos Aires city. *Atmospheric Environment*, *37*(8), 1135–1147. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(02\)00977-9](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(02)00977-9)
- Bolaño-Ortiz, T. R. (2019). *Evaluación de los aerosoles absorbentes en la reducción del albedo en nieve en la primavera austral de los andes centrales* [Tesis Doctoral]. Universidad Tecnológica Nacional .
- Bolaño-Ortiz, T. R., Pascual-Flores, R. M., López-Noreña, A. I., Ruggeri, M. F., Lakkis, S. G., Fernández, R. P., & Puliafito, S. E. (2019). Assessment of absorbing aerosols on austral spring snow albedo reduction by several basins in the Central Andes of Chile from daily satellite observations (2000–2016) and a case study with the WRF-Chem model. *SN Applied Sciences*, *1*(11), 1352. <https://doi.org/10.1007/s42452-019-1256-z>
- Bontemps, S., Defourny, P., Van Bogaert, E., Arino, O., Kalogirou, V., & Ramos Perez, J. (2011). *GLOBCOVER 2009 Products Description and Validation Report*. European Space Agency (ESA) & Université Catholique de Louvain (UCL). http://due.esrin.esa.int/globcover/LandCover2009/GLOBCOVER2009_Validation_Report_2.2.pdf
- Borrego, C., Tchepel, O., Costa, A. M., Amorim, J. H., & Miranda, A. I. (2003). Emission and dispersion modelling of Lisbon air quality at local scale. *Atmospheric Environment*, *37*(37), 5197–5205. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2003.09.004>
- Bouarar, I., Brasseur, G., Petersen, K., Granier, C., Fan, Q., Wang, X., Wang, L., Ji, D., Liu, Z., Xie, Y., Gao, W., & Elguindi, N. (2019). Influence of anthropogenic emission inventories on simulations of air quality in China during winter and summer 2010. *Atmospheric Environment*, *198*(September 2018), 236–256. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2018.10.043>

- Boylan, J. W., & Russell, A. G. (2006). PM and light extinction model performance metrics, goals, and criteria for three-dimensional air quality models. *Atmospheric Environment*, *40*(26), 4946–4959. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.09.087>
- Brasseur, G. P., & Solomon, S. (2005). *Aeronomy of the Middle Atmosphere* (3rd ed., Vol. 32). Springer Netherlands. <https://doi.org/10.1007/1-4020-3824-0>
- Brown, S. S., & Stutz, J. (2012). Nighttime radical observations and chemistry. *Chemical Society Reviews*, *41*(19), 6405. <https://doi.org/10.1039/c2cs35181a>
- Carrasco, F., Pineda-Rojas, A., Ruiz, J., & Bogo, H. (2018). Towards the Implementation of the WRF-Chem Model in Buenos Aires. In *9th international congress on environmental modeling and software (IEMSS)* (Issue 12). Brigham Young University Scholars Archive. <https://scholarsarchive.byu.edu/iemssconference/2018/Posters/12/>
- Carlsaw, D. (2005). Evidence of an increasing NO/NO emissions ratio from road traffic emissions. *Atmospheric Environment*, *39*(26), 4793–4802. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.06.023>
- Carter, W. P. L. (2000). *DOCUMENTATION OF THE SAPRC-99 CHEMICAL MECHANISM FOR VOC REACTIVITY ASSESSMENT*. Air Pollution Research Center and College of Engineering Center for Environmental Research and Technology University of California. <http://www.cert.ucr.edu/~carter/pubs/s99txt.pdf>
- Castell, N., Dauge, F. R., Schneider, P., Vogt, M., Lerner, U., Fishbain, B., Broday, D., & Bartonova, A. (2017). Can commercial low-cost sensor platforms contribute to air quality monitoring and exposure estimates? *Environment International*, *99*, 293–302. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2016.12.007>
- Castesana, P., Diaz Resquin, M., Huneus, N., Puliafito, E., Darras, S., Gómez, D., Granier, C., Osses Alvarado, M., Rojas, N., & Dawidowski, L. (2022). PAPILA dataset: a regional emission inventory of reactive gases for South America based on the combination of local and global information. *Earth System Science Data*, *14*(1), 271–293. <https://doi.org/10.5194/essd-14-271-2022>
- Castro, F. H., Allende, D. G., & Puliafito, E. (2009). Influencia de la resolución de grilla en el modelado de emisiones vehiculares. In *Mecánica Computacional: Vol. XXVIII* (pp. 2393–2411). Asociación Argentina de Mecánica Computacional. <https://cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/article/view/2884>
- Chen, F., & Dudhia, J. (2001). Coupling an Advanced Land Surface–Hydrology Model with the Penn State–NCAR MM5 Modeling System. Part I: Model Implementation and Sensitivity. *Monthly Weather Review*, *129*(4), 569–585. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(2001\)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(2001)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2)
- Chin, M., Rood, R. B., Lin, S.-J., Müller, J.-F., & Thompson, A. M. (2000). Atmospheric sulfur cycle simulated in the global model GOCART: Model description and global properties. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, *105*(D20), 24671–24687. <https://doi.org/10.1029/2000JD900384>
- Cifuentes, F., González, C. M., & Aristizábal, B. H. (2021). Insights to WRF-Chem sensitivity in a zone of complex terrain in the tropical Andes: Effect of boundary conditions, chemical

- mechanisms, nesting, and domain configuration. *Atmospheric Pollution Research*, 12(6), 101093. <https://doi.org/10.1016/j.apr.2021.101093>
- Cirillo, M. C., Lauretis, R. De, Del, R., & Enea, C. (1996). Review Study on European Urban Emission Inventories, Topic report No 30/1996. In *Environmental Science and Pollution Research* (p. 3).
- Cremades, P. (2017). *Modelado de Emisiones por Quema de Biomasa y Evaluación de Impacto en la Calidad de Aire en Escala Regional y Local* [Tesis Doctoral]. Universidad Nacional de Cuyo.
- Cremades, P., Allende, D. G., & Puliafito, S. E. (2013). Simulating silver iodine dispersion with wrf: hail suppression system analysis. In *Mecánica Computacional Vol: Vol. XXXII* (pp. 19–22). Asociación Argentina de Mecánica Computacional. <https://cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/article/view/4516>
- Cremades, P. G., Fernandez, R. P., Allende, D. G., Mulena, G. C., & Puliafito, S. E. (2017). High resolution satellite derived erodibility factors for WRF/Chem windblown dust simulations in Argentina. *Atmósfera*, 30(1), 11–25. <https://doi.org/10.20937/ATM.2017.30.01.02>
- Cremades, P., Puliafito, S. E., Allende, D. G., & Fernandez, R. P. (2011). An approach for using remote sensing products and ground observations in the evaluation of a numerical weather prediction model 2. In *Mecánica Computacional: Vol. XXX* (Issue 45, pp. 1–4). <https://cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/article/view/4004>
- Crippa, M., Guizzardi, D., Muntean, M., Schaaf, E., Dentener, F., van Aardenne, J. A., Monni, S., Doering, U., Olivier, J. G. J., Pagliari, V., & Janssens-Maenhout, G. (2018). Gridded emissions of air pollutants for the period 1970–2012 within EDGAR v4.3.2. *Earth System Science Data*, 10(4), 1987–2013. <https://doi.org/10.5194/essd-10-1987-2018>
- Crippa, M., Solazzo, E., Huang, G., Guizzardi, D., Koffi, E., Muntean, M., Schieberle, C., Friedrich, R., & Janssens-Maenhout, G. (2020). High resolution temporal profiles in the Emissions Database for Global Atmospheric Research. *Scientific Data*, 7(1), 121. <https://doi.org/10.1038/s41597-020-0462-2>
- Crutzen, P. J., & Andreae, M. O. (1990). Biomass Burning in the Tropics: Impact on Atmospheric Chemistry and Biogeochemical Cycles. *Science*, 250(4988), 1669–1678. <https://doi.org/10.1126/science.250.4988.1669>
- Cruzate, G., Gomez, L., Pizarro, M. J., Mercuri, P., & Bancharo., S. (2013). *Suelos de la República Argentina*. SAGyP – INTA – Proyecto PNUD ARG/85/019. <http://www.geointa.inta.gob.ar/2013/05/26/suelos-de-la-republica-argentina/>
- Damian, V., Sandu, A., Damian, M., Potra, F., & Carmichael, G. R. (2002). The kinetic preprocessor KPP—a software environment for solving chemical kinetics. *Computers & Chemical Engineering*, 26(11), 1567–1579. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(02\)00128-X](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(02)00128-X)
- De Meij, A., Krol, M., Dentener, F., Vignati, E., Cuvelier, C., & Thunis, P. (2006). The Sensitivity of Aerosol in Europe to two Different Emission Inventories and Temporal Distribution of Emissions. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 4287–4309. <https://publications.jrc.ec.europa.eu/repository/handle/JRC32586>

- De Ruyter de Wildt, M., Eskes, H., & Boersma, K. F. (2012). The global economic cycle and satellite-derived NO₂ trends over shipping lanes. *Geophysical Research Letters*, *39*(1), n/a-n/a. <https://doi.org/10.1029/2011GL049541>
- Decreto 1074. (2018). *Reglamentacion de la Ley 5965 de proteccion a las fuentes de provision y a los cursos y cuerpos receptores de agua y a la atmosfera*. <https://normas.gba.gob.ar/documentos/0zWjvSXx.pdf>
- Diaz Resquin, M., Santágata, D., Gallardo, L., Gómez, D., Rössler, C., & Dawidowski, L. (2018). Local and remote black carbon sources in the Metropolitan Area of Buenos Aires. *Atmospheric Environment*, *182*, 105–114. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2018.03.018>
- Dos Santos Lucon, O., & Moutinho Dos Santos, E. (2005). The HORUS model—inventory of atmospheric pollutant emissions from industrial combustion in Sao Paulo, Brazil. *Environmental Impact Assessment Review*, *25*(2), 197–214. <https://doi.org/10.1016/J.EIAR.2004.06.010>
- Dudhia, J. (1996). A multi-layer soil temperature model for MM5. In *The Sixth PSU/NCAR mesoscale model users' workshop* (pp. 22–24). National Center for Atmospheric Research. https://www.researchgate.net/profile/Jimmy-Dudhia/publication/259865197_A_Multi-layer_Soil_Temperature_Model_for_MM5/links/0046352e307710e99c000000/A-Multi-layer-Soil-Temperature-Model-for-MM5.pdf
- Duncan, B. N., Prados, A. I., Lamsal, L. N., Liu, Y., Streets, D. G., Gupta, P., Hilsenrath, E., Kahn, R. A., Nielsen, J. E., Beyersdorf, A. J., Burton, S. P., Fiore, A. M., Fishman, J., Henze, D. K., Hostetler, C. A., Krotkov, N. A., Lee, P., Lin, M., Pawson, S., ... Ziemba, L. D. (2014). Satellite data of atmospheric pollution for U.S. air quality applications: Examples of applications, summary of data end-user resources, answers to FAQs, and common mistakes to avoid. *Atmospheric Environment*, *94*, 647–662. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.05.061>
- Dunlea, E. J., Herndon, S. C., Nelson, D. D., Volkamer, R. M., San Martini, F., Sheehy, P. M., Zahniser, M. S., Shorter, J. H., Wormhoudt, J. C., Lamb, B. K., Allwine, E. J., Gaffney, J. S., Marley, N. A., Grutter, M., Marquez, C., Blanco, S., Cardenas, B., Retama, A., Ramos Villegas, C. R., ... Molina, M. J. (2007). Evaluation of nitrogen dioxide chemiluminescence monitors in a polluted urban environment. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *7*(10), 2691–2704. <https://doi.org/10.5194/acp-7-2691-2007>
- Emmons, L. K., Walters, S., Hess, P. G., Lamarque, J. F., Pfister, G. G., Fillmore, D., Granier, C., Guenther, A., Kinnison, D., Laepple, T., Orlando, J., Tie, X., Tyndall, G., Wiedinmyer, C., Baughcum, S. L., & Kloster, S. (2010). Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4). *Geoscientific Model Development*, *3*(1), 43–67. <https://doi.org/10.5194/gmd-3-43-2010>
- Enrique, S., Allende, D., Fernandez, R., Castro, F., & Cremades, P. (2011). New Approaches for Urban and Regional Air Pollution Modelling and Management. In F. Nejadkoorki (Ed.), *Advanced Air Pollution* (pp. 429–454). InTech. <https://doi.org/10.5772/16673>
- EPA. (1991). *Air Emissions Modeling. Biogenic emission sources*. <https://www.epa.gov/air-emissions-modeling/biogenic-emission-sources>
- Fast, J. D., Gustafson, W. I., Easter, R. C., Zaveri, R. A., Barnard, J. C., Chapman, E. G., Grell, G. A., & Peckham, S. E. (2006). Evolution of ozone, particulates, and aerosol direct radiative

- forcing in the vicinity of Houston using a fully coupled meteorology-chemistry-aerosol model. *Journal of Geophysical Research*, 111(D21), D21305. <https://doi.org/10.1029/2005JD006721>
- Fernández, M. E., Gentili, J. O., & Campo, A. M. (2021). Air Pollutants in an Intermediate City: Variability and Interactions with Weather and Anthropogenic Elements in Bahía Blanca, Argentina. *Environmental Processes*, 8(1), 349–375. <https://doi.org/10.1007/s40710-021-00502-6>
- Fernandez, R., Allende, D., Castro, F., Cremades, P., & Puliafito, E. (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 (ASADES)*, 14, 43–50. <http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/99320>
- Fernandez, R. P., Cremades, P. G., Allende, D. G., & Puliafito, S. E. (2010). Sensitivity analysis of the spatial and altitude distributions of pollutants using the weather research and forecasting model with chemistry (wrf/chem). In *Mecánica Computacional: Vol. XXIX* (pp. 8087–8108). Asociación Argentina de Mecánica Computacional. <https://cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/article/view/3585>
- Fernandez, R. P., Kinnison, D. E., Lamarque, J.-F., Tilmes, S., & Saiz-Lopez, A. (2017). Impact of biogenic very short-lived bromine on the Antarctic ozone hole during the 21st century. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 17(3), 1673–1688. <https://doi.org/10.5194/acp-17-1673-2017>
- Fernandez, R. P., Salawitch, R. J., Kinnison, D. E., Lamarque, J.-F., & Saiz-Lopez, A. (2014). Bromine partitioning in the tropical tropopause layer: implications for stratospheric injection. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14(24), 13391–13410. <https://doi.org/10.5194/acp-14-13391-2014>
- Fernandez, R., Schiavone, J. F., Cremades, P. G., Santos, J. R., & Lopez Noreña, A. I. (2017). Development of a New Spatial and Temporal resizing Tool of Natural and Anthropogenic Emissions for use in WRF/Chem Regional Modeling. In *Geophysical Research Abstracts* (Vol. 19, Issues EGU2017-5716, p. 5716). EGU General Assembly. <https://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2017/EGU2017-5716.pdf>
- Ferrier, B. S. (1994). A Double-Moment Multiple-Phase Four-Class Bulk Ice Scheme. Part I: Description. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 51(2), 249–280. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1994\)051<0249:ADMMPF>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1994)051<0249:ADMMPF>2.0.CO;2)
- Folkert Boersma, K. F., Vinken, G. C. M., & Tournadre, J. (2015). Ships going slow in reducing their NOx emissions: changes in 2005–2012 ship exhaust inferred from satellite measurements over Europe. *Environmental Research Letters*, 10(7), 074007. <https://doi.org/10.1088/1748-9326/10/7/074007>
- Garaga, R., Sahu, S. K., & Kota, S. H. (2018). A Review of Air Quality Modeling Studies in India: Local and Regional Scale. *Current Pollution Reports*, 4(2), 59–73. <https://doi.org/10.1007/s40726-018-0081-0>
- Garcia-Ferreyra, M. F., Curci, G., & Lanfri, M. (2016). First Implementation of the WRF-CHIMERE-EDGAR Modeling System Over Argentina. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth*

Observations and Remote Sensing, 9(12), 5304–5314.
<https://doi.org/10.1109/JSTARS.2016.2588502>

Gassó, S., & Torres, O. (2019). Temporal Characterization of Dust Activity in the Central Patagonia Desert (Years 1964–2017). *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 124(6), 3417–3434. <https://doi.org/10.1029/2018JD030209>

Geng, G., Zhang, Q., Martin, R. V., van Donkelaar, A., Huo, H., Che, H., Lin, J., & He, K. (2015). Estimating long-term PM_{2.5} concentrations in China using satellite-based aerosol optical depth and a chemical transport model. *Remote Sensing of Environment*, 166, 262–270. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2015.05.016>

Georgoulas, A. K., Boersma, K. F., van Vliet, J., Zhang, X., van der A, R., Zanis, P., & de Laat, J. (2020). Detection of NO₂ pollution plumes from individual ships with the TROPOMI/S5P satellite sensor. *Environmental Research Letters*, 15(12), 124037. <https://doi.org/10.1088/1748-9326/abc445>

Gery, M. W., Whitten, G. Z., Killus, J. P., & Dodge, M. C. (1989). A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling. *Journal of Geophysical Research*, 94(D10), 12925. <https://doi.org/10.1029/JD094iD10p12925>

Giglio, L., Loboda, T., Roy, D. P., Quayle, B., & Justice, C. O. (2009). An active-fire based burned area mapping algorithm for the MODIS sensor. *Remote Sensing of Environment*, 113(2), 408–420. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2008.10.006>

Giglio, L., Randerson, J. T., & van der Werf, G. R. (2013). Analysis of daily, monthly, and annual burned area using the fourth-generation global fire emissions database (GFED4). *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 118(1), 317–328. <https://doi.org/10.1002/jgrg.20042>

Gochis, D. J., Barlage, M., Cabell, R., Casali, M., Dugger, A., FitzGerald, K., McAllister, M., McCreight, J., RafieeiNasab, A., Read, L., Sampson, K., Yates, D., & Zhang, Y. (2020). *The WRF-Hydro[®] modeling system technical description, (Version 5.1.1)*. United States National Center For Atmospheric Research, NCAR Technical Note. <https://ral.ucar.edu/sites/default/files/public/projects/wrf-hydro/technical-description-user-guide/wrf-hydrov5.2technicaldescription.pdf>

Goldstein, A. H., & Galbally, I. E. (2007). Known and Unexplored Organic Constituents in the Earth's Atmosphere. *Environmental Science & Technology*, 41(5), 1514–1521. <https://doi.org/10.1021/es072476p>

Gómez, D., Nakazawa, T., Furuta, N., & Smichowski, P. (2017). Multielemental chemical characterisation of fine urban aerosols collected in Buenos Aires and Tokyo by plasma-based techniques. *Microchemical Journal*, 133, 346–351. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2017.03.041>

Gómez Peláez, L. M., Santos, J. M., de Almeida Albuquerque, T. T., Reis, N. C., Andreão, W. L., & de Fátima Andrade, M. (2020). Air quality status and trends over large cities in South America. *Environmental Science & Policy*, 114(April), 422–435. <https://doi.org/10.1016/j.envsci.2020.09.009>

- González, C. M., Ynoue, R. Y., Vara-Vela, A., Rojas, N. Y., & Aristizábal, B. H. (2018). High-resolution air quality modeling in a medium-sized city in the tropical Andes: Assessment of local and global emissions in understanding ozone and PM10 dynamics. *Atmospheric Pollution Research*, 9(5), 934–948. <https://doi.org/10.1016/j.apr.2018.03.003>
- Granier, C., Darras, S., Denier van der Gon, H., Doubalova, J., Elguindi, N., Galle, B., Gauss, M., Guevara, M., Jalkanen, J.-P., Kuenen, J., Lioussé, C., Quack, B., Simpson, D., & Sindelarova, K. (2019). *The Copernicus Atmosphere Monitoring Service global and regional emissions, Copernicus Atmosphere Monitoring Service (CAMS) report*. <https://doi.org/10.24380/d0bn-kx16>
- Grell, G. A., & Dévényi, D. (2002). A generalized approach to parameterizing convection combining ensemble and data assimilation techniques. *Geophysical Research Letters*, 29(14), 38-1-38–4. <https://doi.org/10.1029/2002GL015311>
- Grell, G. A., & Freitas, S. R. (2014). A scale and aerosol aware stochastic convective parameterization for weather and air quality modeling. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14(10), 5233–5250. <https://doi.org/10.5194/acp-14-5233-2014>
- Grell, G., Fast, J., Gustafson, W. I., Peckham, S. E., McKeen, S., Salzman, M., & Freitas, S. (2010). On-Line Chemistry Within WRF: Description and Evaluation of a State-of-the-Art Multiscale Air Quality and Weather Prediction Model. In *Integrated Systems of Meso-Meteorological and Chemical Transport Models* (pp. 41–54). Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-13980-2_3
- Grell, G., Freitas, S. R., Stuefer, M., & Fast, J. (2011). Inclusion of biomass burning in WRF-Chem: impact of wildfires on weather forecasts. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 11(11), 5289–5303. <https://doi.org/10.5194/acp-11-5289-2011>
- Grell, G., Peckham, S. E., Schmitz, R., McKeen, S. A., Frost, G., Skamarock, W. C., & Eder, B. (2005). Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. *Atmospheric Environment*, 39(37), 6957–6975. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.04.027>
- Guenther, A., Karl, T., Harley, P., Wiedinmyer, C., Palmer, P. I., & Geron, C. (2006). Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature). *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6(11), 3181–3210. <https://doi.org/10.5194/acp-6-3181-2006>
- Guenther, A., Zimmerman, P., & Wildermuth, M. (1994). Natural volatile organic compound emission rate estimates for U.S. woodland landscapes. *Atmospheric Environment*, 28(6), 1197–1210. [https://doi.org/10.1016/1352-2310\(94\)90297-6](https://doi.org/10.1016/1352-2310(94)90297-6)
- Guevara, M., Pay, M. T., Martínez, F., Soret, A., Denier van der Gon, H., & Baldasano, J. M. (2014). Inter-comparison between HERMESv2.0 and TNO-MACC-II emission data using the CALIOPE air quality system (Spain). *Atmospheric Environment*, 98, 134–145. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.08.067>
- Guevara, M., Tena, C., Porquet, M., Jorba, O., & Pérez García-Pando, C. (2019). HERMESv3, a stand-alone multi-scale atmospheric emission modelling framework – Part 1: global and regional module. *Geoscientific Model Development*, 12(5), 1885–1907. <https://doi.org/10.5194/gmd-12-1885-2019>

- Gulia, S., Shiva Nagendra, S. M., Khare, M., & Khanna, I. (2015). Urban air quality management-A review. *Atmospheric Pollution Research*, 6(2), 286–304. <https://doi.org/10.5094/APR.2015.033>
- Hoesly, R. M., Smith, S. J., Feng, L., Klimont, Z., Janssens-Maenhout, G., Pitkanen, T., Seibert, J. J., Vu, L., Andres, R. J., Bolt, R. M., Bond, T. C., Dawidowski, L., Kholod, N., Kurokawa, J., Li, M., Liu, L., Lu, Z., Moura, M. C. P., O'Rourke, P. R., & Zhang, Q. (2018). Historical (1750–2014) anthropogenic emissions of reactive gases and aerosols from the Community Emissions Data System (CEDS). *Geoscientific Model Development*, 11(1), 369–408. <https://doi.org/10.5194/gmd-11-369-2018>
- Hong, S., & Lim, J. J. (2006). The WRF Single-Moment 6-Class Microphysics Scheme (WSM6). *Asia-Pacific Journal of Atmospheric Sciences*, 42, 129–151.
- Hoshyaripour, G., Brousseau, G., Andrade, M. F., Gavidia-Calderón, M., Bouarar, I., & Ynoue, R. Y. (2016). Prediction of ground-level ozone concentration in São Paulo, Brazil: Deterministic versus statistic models. *Atmospheric Environment*, 145, 365–375. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.09.061>
- Hu, X.-M. (2015). BOUNDARY LAYER (ATMOSPHERIC) AND AIR POLLUTION | Air Pollution Meteorology. In *Encyclopedia of Atmospheric Sciences* (pp. 227–236). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-382225-3.00499-0>
- Iacono, M. J., Delamere, J. S., Mlawer, E. J., Shephard, M. W., Clough, S. A., & Collins, W. D. (2008). Radiative forcing by long-lived greenhouse gases: Calculations with the AER radiative transfer models. *Journal of Geophysical Research*, 113(D13), D13103. <https://doi.org/10.1029/2008JD009944>
- INDEC. (2016). *National population, household and housing census*.
- INTA. (1990). *Atlas de suelos de la República Argentina*. Proyecto PNUD ARG/85/019. http://meran.fcv.unlp.edu.ar/meran/opac-detail.pl?id1=8508#detalle_grupo_9593
- IPCC. (2007). *Climate Change 2007: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. <https://www.ipcc.ch/report/ar4/syr/>
- Jacobson, M. Z. (2005). *Fundamentals of Atmospheric Modeling* (2nd ed.). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139165389>
- Janjić, Z. I. (2001). *Nonsingular Implementation of the Mellor-Yamada Level 2.5 Scheme in the NCEP Meso model* (p. 66). United States National Centers for Environmental Prediction, Office Note No. 437.
- Janssen, S., Dumont, G., Fierens, F., & Mensink, C. (2008). Spatial interpolation of air pollution measurements using CORINE land cover data. *Atmospheric Environment*, 42(20), 4884–4903. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.02.043>
- Janssens-Maenhout, G., Crippa, M., Guizzardi, D., Dentener, F., Muntean, M., Pouliot, G., Keating, T., Zhang, Q., Kurokawa, J., Wankmüller, R., Denier van der Gon, H., Kuenen, J. J. P., Klimont, Z., Frost, G., Darras, S., Koffi, B., & Li, M. (2015). HTAP_v2.2: a mosaic of regional and global emission grid maps for 2008 and 2010 to study hemispheric transport of air pollution.

Atmospheric Chemistry and Physics, 15(19), 11411–11432. <https://doi.org/10.5194/acp-15-11411-2015>

- Janssens-Maenhout, G., Crippa, M., Guizzardi, D., Muntean, M., Schaaf, E., Dentener, F., Bergamaschi, P., Pagliari, V., Olivier, J. G. J., Peters, J. A. H. W., van Aardenne, J. A., Monni, S., Doering, U., Petrescu, A. M. R., Solazzo, E., & Oreggioni, G. D. (2019). EDGAR v4.3.2 Global Atlas of the three major greenhouse gas emissions for the period 1970–2012. *Earth System Science Data*, 11(3), 959–1002. <https://doi.org/10.5194/essd-11-959-2019>
- Jasan, R. C., Plá, R. R., Invernizzi, R., & Dos Santos, M. (2009). Characterization of atmospheric aerosol in Buenos Aires, Argentina. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 281(1), 101–105. <https://doi.org/10.1007/s10967-009-0071-1>
- Jiménez Mejía, J. F. (2016). *Altura de la Capa de Mezcla en un área urbana, montañosa y tropical. Caso de estudio: Valle de Aburrá (Colombia)*. Universidad de Antioquia.
- Kain, J. S. (2004). The Kain–Fritsch Convective Parameterization: An Update. *Journal of Applied Meteorology*, 43(1), 170–181. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(2004\)043<0170:TKCPAU>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(2004)043<0170:TKCPAU>2.0.CO;2)
- Klimont, Z., Kupiainen, K., Heyes, C., Purohit, P., Cofala, J., Rafaj, P., Borken-Kleefeld, J., & Schöpp, W. (2017). Global anthropogenic emissions of particulate matter including black carbon. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 17(14), 8681–8723. <https://doi.org/10.5194/acp-17-8681-2017>
- Kuenen, J. J. P., Visschedijk, A. J. H., Jozwicka, M., & Denier van der Gon, H. A. C. (2014). TNO-MACC_II emission inventory; a multi-year (2003–2009) consistent high-resolution European emission inventory for air quality modelling. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14(20), 10963–10976. <https://doi.org/10.5194/acp-14-10963-2014>
- Kuik, F., Lauer, A., Churkina, G., Denier van der Gon, H. A. C., Fenner, D., Mar, K. A., & Butler, T. M. (2016). Air quality modelling in the Berlin–Brandenburg region using WRF-Chem v3.7.1: sensitivity to resolution of model grid and input data. *Geoscientific Model Development*, 9(12), 4339–4363. <https://doi.org/10.5194/gmd-9-4339-2016>
- Kurata, G., Carmichael, G. R., Streets, D. G., Kitada, T., Tang, Y., Woo, J.-H., & Thongboonchoo, N. (2004). Relationships between emission sources and air mass characteristics in East Asia during the TRACE-P period. *Atmospheric Environment*, 38(40), 6977–6987. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.05.062>
- Kusaka, H., & Kimura, F. (2004). Coupling a Single-Layer Urban Canopy Model with a Simple Atmospheric Model: Impact on Urban Heat Island Simulation for an Idealized Case. *Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II*, 82(1), 67–80. <https://doi.org/10.2151/jmsj.82.67>
- Lamarque, J.-F., Emmons, L. K., Hess, P. G., Kinnison, D. E., Tilmes, S., Vitt, F., Heald, C. L., Holland, E. A., Lauritzen, P. H., Neu, J., Orlando, J. J., Rasch, P. J., & Tyndall, G. K. (2012). CAM-chem: description and evaluation of interactive atmospheric chemistry in the Community Earth System Model. *Geoscientific Model Development*, 5(2), 369–411. <https://doi.org/10.5194/gmd-5-369-2012>

- Laprise, R. (1992). The Euler Equations of Motion with Hydrostatic Pressure as an Independent Variable. *Monthly Weather Review*, 120(1), 197–207. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(1992\)120<0197:TEOMW>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(1992)120<0197:TEOMW>2.0.CO;2)
- Ley 1356. (2004). *Preservación recurso aire y prevención y control de la contaminación atmosférica*. Reglamentada por Decreto N° 198/006 del 22/02/2006.
- Li, M., Song, Y., Mao, Z., Liu, M., & Huang, X. (2016). Impacts of thermal circulations induced by urbanization on ozone formation in the Pearl River Delta region, China. *Atmospheric Environment*, 127, 382–392. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.10.075>
- Li, Q., Badia, A., Fernandez, R. P., Mahajan, A. S., López-Noreña, A. I., Zhang, Y., Wang, S., Puliafito, E., Cuevas, C. A., & Saiz-Lopez, A. (2021). Chemical Interactions Between Ship-Originated Air Pollutants and Ocean-Emitted Halogens. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 126(4). <https://doi.org/10.1029/2020JD034175>
- Lopez-Noreña, A., Fernandez, R. P., & Puliafito, S. E. (2019). Especiación de inventarios de emisiones de aerosoles y compuestos orgánicos volátiles para el modelo WRF-Chem, aplicado a los esquemas RADM-2, CBM-Z y MOZART. In M. C. Panigatti (Ed.), *Contaminación Atmosférica e Hídrica en Argentina - Tomo V* (Universida, pp. 102–113). edUTecNe. <http://hdl.handle.net/20.500.12272/4406>
- López-Noreña, A. I., Berná, L., Tames, M. F., Millán, E. N., Puliafito, S. E., & Fernandez, R. P. (2022). Influence of emission inventory resolution on the modeled spatio-temporal distribution of air pollutants in Buenos Aires, Argentina, using WRF-Chem. *Atmospheric Environment*, 269, 118839. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2021.118839>
- Lopez-Noreña, A., Li, Q., B., A., Berná, L., Puliafito, E., Saiz-Lopez, A., & Fernández, R. (2019). Evaluating the regional impacts of anthropogenic and natural emissions over South America. In *The Chemistry Climate Model Initiative (CCMI) Science Workshop, Agosto 7-9*. The Chinese University of Hong Kong (CUHK).
- Ma, J., & van Aardenne, J. A. (2004). Impact of different emission inventories on simulated tropospheric ozone over China: a regional chemical transport model evaluation. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 4(4), 877–887. <https://doi.org/10.5194/acp-4-877-2004>
- Madronich, S. (1987). Photodissociation in the atmosphere: 1. Actinic flux and the effects of ground reflections and clouds. *Journal of Geophysical Research*, 92(D8), 9740. <https://doi.org/10.1029/JD092iD08p09740>
- Mandel, J., Beezley, J. D., & Kochanski, A. K. (2011). Coupled atmosphere-wildland fire modeling with WRF 3.3 and SFIRE 2011. *Geoscientific Model Development*, 4(3), 591–610. <https://doi.org/10.5194/gmd-4-591-2011>
- Martin, R. V. (2008). Satellite remote sensing of surface air quality. *Atmospheric Environment*, 42(34), 7823–7843. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.07.018>
- Mateos, A. C., Amarillo, A. C., Carreras, H. A., & González, C. M. (2018). Land use and air quality in urban environments: Human health risk assessment due to inhalation of airborne particles. *Environmental Research*, 161, 370–380. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2017.11.035>

- Mazzeo, N. A., & Venegas, L. E. (2008). Design of an Air-Quality Surveillance System for Buenos Aires City Integrated by a NO_x Monitoring Network and Atmospheric Dispersion Models. *Environmental Modeling & Assessment*, 13(3), 349–356. <https://doi.org/10.1007/s10666-007-9101-y>
- McDuffie, E. E., Smith, S. J., O'Rourke, P., Tibrewal, K., Venkataraman, C., Marais, E. A., Zheng, B., Crippa, M., Brauer, M., & Martin, R. V. (2020). A global anthropogenic emission inventory of atmospheric pollutants from sector- and fuel-specific sources (1970–2017): an application of the Community Emissions Data System (CEDS). *Earth System Science Data*, 12(4), 3413–3442. <https://doi.org/10.5194/essd-12-3413-2020>
- Michalakes, J., Dudhia, J., Gill, D., Henderson, T., Klemp, J., Skamarok, W., & Wang, W. (2005). The weather research and forecast model: software architecture and performance. *Use of High Performance Computing in Meteorology*, June, 156–168. https://doi.org/10.1142/9789812701831_0012
- Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible de la Nación. (2021). *Informe del estado del ambiente*.
- Misenis, C., & Zhang, Y. (2010). An examination of sensitivity of WRF/Chem predictions to physical parameterizations, horizontal grid spacing, and nesting options. *Atmospheric Research*, 97(3), 315–334. <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2010.04.005>
- Mlawer, E. J., Taubman, S. J., Brown, P. D., Iacono, M. J., & Clough, S. A. (1997). Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 102(D14), 16663–16682. <https://doi.org/10.1029/97JD00237>
- Monin, A. S., & Obukhov, A. M. (1954). Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. In *Contributions of the Geophysical Institute of the Slovak Academy of Sciences* (pp. 151(163), e187). https://moodle2.units.it/pluginfile.php/267453/mod_resource/content/1/ABL_lecture_13.pdf
- Mulena, G. C. (2017). *APLICACIÓN DE LAS EMISIONES DE AEROSOL DE SULFATOS TROPOSFÉRICOS PARA MITIGAR FENÓMENOS METEOROLÓGICOS CON TEMPERATURAS DIARIAS EXTREMAS CÁLIDAS*. Universidad Tecnológica Nacional.
- Mulena, G. C., Allende, D. G., Puliafito, S. E., Lakkis, S. G., Cremades, P. G., & Ulke, A. G. (2016). Examining the influence of meteorological simulations forced by different initial and boundary conditions in volcanic ash dispersion modelling. *Atmospheric Research*, 176–177, 29–42. <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2016.02.009>
- Naciones Unidas. (2014). World Urbanization Prospects: The 2014 Revision, Highlights (ST/ESA/SER.A/352). In *New York, United*. <http://esa.un.org/unpd/wup/Highlights/WUP2014-Highlights.pdf>
- NCEP. (2015). National Centers for Environmental Prediction/National Weather Service/NOAA/U.S. Department of Commerce. 2015, updated daily. NCEP GDAS/FNL 0.25 Degree Global Tropospheric Analyses and Forecast Grids. In *Dataset*. Research Data Archive at the National Center for Atmospheric Research, Computational and Information Systems Laboratory. <https://doi.org/https://doi.org/10.5065/D65Q4T4Z>

- Oberkampff, W. L., Trucano, T. G., & Hirsch, C. (2004). Verification, validation, and predictive capability in computational engineering and physics. *Applied Mechanics Reviews*, 57(5), 345–384. <https://doi.org/10.1115/1.1767847>
- Oda, T., & Maksyutov, S. (2011). A very high-resolution (1 km×1 km) global fossil fuel emission inventory derived using a point source database and satellite observations of nighttime lights. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 11(2), 543–556. <https://doi.org/10.5194/acp-11-543-2011>
- Olcese, L. E., & Toselli, B. M. (2002). Some aspects of air pollution in Córdoba, Argentina. *Atmospheric Environment*, 36(2), 299–306. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(01\)00336-3](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(01)00336-3)
- OMS. (2006). *Air Quality Guidelines: Global Update 2005*. https://www.who.int/phe/health_topics/outdoorair/outdoorair_aqg/en/
- OMS. (2016). *Ambient Air Pollution a Global Assessment of Exposure Burden*. World Health Organization. https://apps.who.int/iris/handle/10665/250141?locale-attribute=ar&mbid=synd_yahoolife
- OMS. (2021). *WHO global air quality guidelines*.
- Osses, M., Rojas, N., Ibarra, C., Valdebenito, V., Laengle, I., Pantoja, N., Osses, D., Basoa, K., Tolvett, S., Huneus, N., Gallardo, L., & Gómez, B. (2022). High-resolution spatial-distribution maps of road transport exhaust emissions in Chile, 1990–2020. *Earth System Science Data*, 14(3), 1359–1376. <https://doi.org/10.5194/essd-14-1359-2022>
- Pachón, J., Galvis, B., Lombana, O., Carmona, L., Fajardo, S., Rincón, A., Meneses, S., Chaparro, R., Nedbor-Gross, R., & Henderson, B. (2018). Development and Evaluation of a Comprehensive Atmospheric Emission Inventory for Air Quality Modeling in the Megacity of Bogotá. *Atmosphere*, 9(2), 49. <https://doi.org/10.3390/atmos9020049>
- Pal Arya, S. (1999). *Air Pollution Meteorology and Dispersion*. Oxford University Press.
- Pascual, R. (2019). *Impacto de las emisiones de aerosoles sobre las precipitaciones de los Andes Centrales* [Tesis Doctoral]. Universidad Tecnológica Nacional .
- Paulson, C. A. (1970). The Mathematical Representation of Wind Speed and Temperature Profiles in the Unstable Atmospheric Surface Layer. *Journal of Applied Meteorology*, 9(6), 857–861. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1970\)009<0857:TMROWS>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1970)009<0857:TMROWS>2.0.CO;2)
- Peckham, S., Grell, G., McKeen, S., Fast, J., Gustafson, W., Ghan, S., Zaveri, R., Easter, R., Barnard, J., Chapman, E., Wiedeinmyer, C., Schmitz, R., Salzmann, M., & Freitas, S. (2010). *WRF/Chem Version 3.2 Users Guide*. USA National Center for Atmospheric Research (NCAR).
- Peterson, M. R., Rickman, E. E., & Homolya, J. B. (2002). *Data Analysis and Validation Support for PM2.5 Chemical Speciation Networks; prepared for the U.S. Environmental Protection Agency/Office of Air Quality*. <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/citations?doi=10.1.1.136.6081>

- Pincus, R., Barker, H. W., & Morcrette, J.-J. (2003). A fast, flexible, approximate technique for computing radiative transfer in inhomogeneous cloud fields. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, *108*(D13), n/a-n/a. <https://doi.org/10.1029/2002JD003322>
- Pineda Rojas, A. L., Borge, R., Mazzeo, N. A., Saurral, R. I., Matarazzo, B. N., Cordero, J. M., & Kropff, E. (2020). High PM10 concentrations in the city of Buenos Aires and their relationship with meteorological conditions. *Atmospheric Environment*, *241*, 117773. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2020.117773>
- Placet, M. (2000). Emissions of ozone precursors from stationary sources: a critical review. *Atmospheric Environment*, *34*(12–14), 2183–2204. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(99\)00464-1](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(99)00464-1)
- PNUMA. (2012). *Proyecto Geo Ciudades*. https://wedocs.unep.org/bitstream/handle/20.500.11822/250/PNUMA_Informe_de_S%C3%A1ntesis_de_las_Evaluaciones_2012-2013.ES.pdf?sequence=3&isAllowed=y
- Policarpo, N. A., Silva, C., Lopes, T. F. A., Araújo, R. dos S., Cavalcante, F. S. Á., Pitombo, C. S., & Oliveira, M. L. M. de. (2018). Road vehicle emission inventory of a Brazilian metropolitan area and insights for other emerging economies. *Transportation Research Part D: Transport and Environment*, *58*, 172–185. <https://doi.org/10.1016/j.trd.2017.12.004>
- Puliafito, E., Guevara, M., & Puliafito, C. (2003). Characterization of urban air quality using GIS as a management system. *Environmental Pollution*, *122*(1), 105–117. [https://doi.org/10.1016/S0269-7491\(02\)00278-6](https://doi.org/10.1016/S0269-7491(02)00278-6)
- Puliafito, E., Puliafito, C., Quero, J., & Guerreiro, P. (1998). Airborne Pollutants from Mobile Sources for the City of Mendoza, Argentina. In *Urban Ecology* (pp. 99–103). Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-88583-9_16
- Puliafito, S., Bolaño-Ortiz, T. R., Fernandez, R. P., Berná, L. L., Pascual-Flores, R. M., Urquiza, J., López-Noreña, A. I., & Tames, M. F. (2021). High-resolution seasonal and decadal inventory of anthropogenic gas-phase and particle emissions for Argentina. *Earth System Science Data*, *13*(10), 5027–5069. <https://doi.org/10.5194/essd-13-5027-2021>
- Puliafito, S. E., & Allende, D. (2007). Emission patterns of urban air pollution. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquía*, *42*(December), 38–56. <https://www.researchgate.net/publication/262466635>
- Puliafito, S. E., Allende, D., Fernández, R., Castro, F., & Cremades, P. (2011). New Approaches for Urban and Regional Air Pollution Modelling and Management. *Advanced Air Pollution*, 429–454. <https://www.researchgate.net/publication/221914542%0ANew>
- Puliafito, S. E., Allende, D. G., Castesana, P. S., & Ruggeri, M. F. (2017). High-resolution atmospheric emission inventory of the argentine energy sector. Comparison with EDGAR global emission database. *Heliyon*, *3*(12), e00489. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2017.e00489>
- Puliafito, S. E., Allende, D. G., Mulena, C. G., Cremades, P., & Lakkis, S. G. (2015). Evaluation of the WRF model configuration for Zonda wind events in a complex terrain. *Atmospheric Research*, *166*, 24–32. <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2015.06.011>

- Puliafito, S. E., Allende, D., Pinto, S., & Castesana, P. (2015). High resolution inventory of GHG emissions of the road transport sector in Argentina. *Atmospheric Environment*, *101*, 303–311. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.11.040>
- Puliafito, S. E., Bolaño-Ortiz, T., Berná, L., & Pascual Flores, R. (2020). High resolution inventory of atmospheric emissions from livestock production, agriculture, and biomass burning sectors of Argentina. *Atmospheric Environment*, *223*, 117248. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2019.117248>
- Ratto, G., Videla, F., Reyna Almandos, J., & Maronna, R. (2018). Air quality at La Plata Conglomerate, Argentina: Review and prospective study to improve the present situation. *AIMS Geosciences*, *4*(1), 88–125. <https://doi.org/10.3934/geosci.2018.1.88>
- Reich, S., Magallanes, J., Dawidowski, L., Gómez, D., Grošelj, N., & Zupan, J. (2006). An Analysis of Secondary Pollutants in Buenos Aires City. *Environmental Monitoring and Assessment*, *119*(1–3), 441–457. <https://doi.org/10.1007/s10661-005-9035-2>
- Riojas-Rodríguez, H., Soares da Silva, A., Texcalac-Sangrador, J. L., & Moreno-Banda, G. L. (2016). Air pollution management and control in Latin America and the Caribbean: implications for climate change. *Pan American Journal of Public Health*, *40*(3).
- Ristori, P. (2003). Aerosol optical properties measured in Argentina: wavelength dependence and variability based on sun photometer measurements. *Optics and Lasers in Engineering*, *40*(1–2), 91–104. [https://doi.org/10.1016/S0143-8166\(02\)00057-X](https://doi.org/10.1016/S0143-8166(02)00057-X)
- Ritter, M., Müller, M. D., Jorba, O., Parlow, E., & Liu, L.-J. S. (2013). Impact of chemical and meteorological boundary and initial conditions on air quality modeling: WRF-Chem sensitivity evaluation for a European domain. *Meteorology and Atmospheric Physics*, *119*(1–2), 59–70. <https://doi.org/10.1007/s00703-012-0222-8>
- Rodríguez, E., Morris, C. S., Belz, J. E., Chapin, E. C., Martin, J. M., Daffer, W. ., & Hensley, S. (2005). *An assessment of the SRTM topographic products, Technical Report JPL D-31639.*
- Romero, Y., Chicchon, N., Duarte, F., Noel, J., Ratti, C., & Nyhan, M. (2020). Quantifying and spatial disaggregation of air pollution emissions from ground transportation in a developing country context: Case study for the Lima Metropolitan Area in Peru. *Science of The Total Environment*, *698*, 134313. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.134313>
- Saiz-Lopez, A., Plane, J. M. C., Cuevas, C. A., Mahajan, A. S., Lamarque, J.-F., & Kinnison, D. E. (2016). Nighttime atmospheric chemistry of iodine. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *16*(24), 15593–15604. <https://doi.org/10.5194/acp-16-15593-2016>
- Saiz-Lopez, A., & von Glasow, R. (2012). Reactive halogen chemistry in the troposphere. *Chemical Society Reviews*, *41*(19), 6448. <https://doi.org/10.1039/c2cs35208g>
- Sakulyanontvittaya, T., Duhl, T., Wiedinmyer, C., Helmig, D., Matsunaga, S., Potosnak, M., Milford, J., & Guenther, A. (2008). Monoterpene and Sesquiterpene Emission Estimates for the United States. *Environmental Science & Technology*, *42*(5), 1623–1629. <https://doi.org/10.1021/es702274e>
- Sander, S., Friedl, R. R., Ravishankara, A. R., Golden, D. M., Kolb, C. E., Kurylo, M. J., Huie, R. E., Orkin, V. L., Molina, M. J., Moortgat, G. K., & Finlayson-Pitts, B. J. (2003). Chemical Kinetics

and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies, Evaluation 14. In *JPL Publication 02-25*. NASA, Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology.

- Sandu, A., Daescu, D. N., & Carmichael, G. R. (2003). Direct and adjoint sensitivity analysis of chemical kinetic systems with KPP: Part I—theory and software tools. *Atmospheric Environment*, *37*(36), 5083–5096. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2003.08.019>
- Sandu, A., & Sander, R. (2006). Technical note: Simulating chemical systems in Fortran90 and Matlab with the Kinetic PreProcessor KPP-2.1. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *6*(1), 187–195. <https://doi.org/10.5194/acp-6-187-2006>
- Schaub, D., Boersma, K. F., Kaiser, J. W., Weiss, A. K., Folini, D., Eskes, H. J., & Buchmann, B. (2006). Comparison of GOME tropospheric NO₂ columns with NO₂ profiles deduced from ground-based in situ measurements. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *6*(11), 3211–3229. <https://doi.org/10.5194/acp-6-3211-2006>
- Schiavone, J. F. (2018). *Desarrollo de una Herramienta de Redimensionamiento Espacial y Temporal de Emisiones Naturales y Antropogénicas* [Tesina de Grado]. Universidad Nacional de Cuyo.
- Schiavone, J. F., Fernandez, R. P., Lopez Noreña, A. I., Santos, J. R., & Puliafito, S. E. (2017). Desarrollo de una herramienta de redimensionamiento espacial y temporal de emisiones naturales y antropogénicas. In *PROIMCA - PRODECA*.
- Schiavone, J. F., Lopez Noreña, A. I., & Fernandez, R. P. (2017). Desarrollo de una Herramienta de Redimensionamiento Espacial y Temporal de Emisiones Naturales y Antropogénicas. In *Pre-Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Asociación de Universidades Grupo Montevideo (AUGM)*.
- Schürmann, G. J., Algieri, A., Hedgecock, I. M., Manna, G., Pirrone, N., & Sprovieri, F. (2009). Modelling local and synoptic scale influences on ozone concentrations in a topographically complex region of Southern Italy. *Atmospheric Environment*, *43*(29), 4424–4434. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.06.017>
- Seinfeld, J. H., & Pandis, S. N. (2006). *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change* (Wiley, Ed.; Second edi). John Wiley & Sons, Inc.
- Shahid, M. Z., Chishtie, F., Bilal, M., & Shahid, I. (2021). WRF-Chem Simulation for Modeling Seasonal Variations and Distributions of Aerosol Pollutants over the Middle East. *Remote Sensing*, *13*(11), 2112. <https://doi.org/10.3390/rs13112112>
- Sicard, P., Crippa, P., De Marco, A., Castruccio, S., Giani, P., Cuesta, J., Paoletti, E., Feng, Z., & Anav, A. (2021). High spatial resolution WRF-Chem model over Asia: Physics and chemistry evaluation. *Atmospheric Environment*, *244*, 118004. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2020.118004>
- Simpson, D., Guenther, A., Hewitt, C. N., & Steinbrecher, R. (1995). Biogenic emissions in Europe: 1. Estimates and uncertainties. *Journal of Geophysical Research*, *100*(D11), 22875. <https://doi.org/10.1029/95JD02368>

- Skamarock, W. C., & Klemp, J. B. (2008). A time-split nonhydrostatic atmospheric model for weather research and forecasting applications. *Journal of Computational Physics*, 227(7), 3465–3485. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.01.037>
- Skamarock, W. C., Klemp, J. B., Dudhia, J., Gill, D. O., Barker, D., Duda, M. G., Huang, X.-Y., Wang, W., & Powers, J. G. (2008). A Description of the Advanced Research WRF Version 3. In *No. NCAR/TN-475+STR*. <https://doi.org/10.5065/D68S4MVH>
- Skamarock, W. C., Klemp, J. B., Dudhia, J., Gill, D. O., Liu, Z., Berner, J., Wang, W., Powers, J. G., Duda, M. G., Barker, D., & Huang, X.-Y. (2021). *A Description of the Advanced Research WRF Model Version 4.3*. <https://doi.org/10.5065/1dfh-6p97>
- Solazzo, E., Bianconi, R., Vautard, R., Appel, K. W., Moran, M. D., Hogrefe, C., Bessagnet, B., Brandt, J., Christensen, J. H., Chemel, C., Coll, I., Denier van der Gon, H., Ferreira, J., Forkel, R., Francis, X. V., Grell, G., Grossi, P., Hansen, A. B., Jeričević, A., ... Galmarini, S. (2012). Model evaluation and ensemble modelling of surface-level ozone in Europe and North America in the context of AQMEII. *Atmospheric Environment*, 53, 60–74. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.01.003>
- Stensrud, D. J. (2007). *Parameterization schemes: keys to understanding numerical weather prediction models* (Cambridge). Cambridge University.
- Stockwell, W. R., Kirchner, F., Kuhn, M., & Seefeld, S. (1997). A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 102(D22), 25847–25879. <https://doi.org/10.1029/97JD00849>
- Stockwell, W. R., Lawson, C. V., Saunders, E., & Goliff, W. S. (2011). A Review of Tropospheric Atmospheric Chemistry and Gas-Phase Chemical Mechanisms for Air Quality Modeling. *Atmosphere*, 3(1), 1–32. <https://doi.org/10.3390/atmos3010001>
- Stockwell, W. R., Middleton, P., Chang, J. S., & Tang, X. (1990). The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. *Journal of Geophysical Research*, 95(D10), 16343. <https://doi.org/10.1029/JD095iD10p16343>
- Tao, Z., Larson, S. M., Williams, A., Caughey, M., & Wuebbles, D. J. (2004). Sensitivity of regional ozone concentrations to temporal distribution of emissions. *Atmospheric Environment*, 38(37), 6279–6285. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.08.042>
- Tessum, C. W., Hill, J. D., & Marshall, J. D. (2015). Twelve-month, 12 km resolution North American WRF-Chem v3.4 air quality simulation: performance evaluation. *Geoscientific Model Development*, 8(4), 957–973. <https://doi.org/10.5194/gmd-8-957-2015>
- Tie, X., Madronich, S., Li, G., Ying, Z., Zhang, R., Garcia, A. R., Lee-Taylor, J., & Liu, Y. (2007). Characterizations of chemical oxidants in Mexico City: A regional chemical dynamical model (WRF-Chem) study. *Atmospheric Environment*, 41(9), 1989–2008. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.10.053>
- Tuccella, P., Curci, G., Visconti, G., Bessagnet, B., Menut, L., & Park, R. J. (2012). Modeling of gas and aerosol with WRF/Chem over Europe: Evaluation and sensitivity study. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 117(D3), n/a-n/a. <https://doi.org/10.1029/2011JD016302>

- Vardoulakis, S., Fisher, B. E. A., Pericleous, K., & Gonzalez-Flesca, N. (2003). Modelling air quality in street canyons: a review. *Atmospheric Environment*, 37(2), 155–182. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(02\)00857-9](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(02)00857-9)
- Vasconcellos, P. C., Souza, D. Z., Ávila, S. G., Araújo, M. P., Naoto, E., Nascimento, K. H., Cavalcante, F. S., Dos Santos, M., Smichowski, P., & Behrentz, E. (2011). Comparative study of the atmospheric chemical composition of three South American cities. *Atmospheric Environment*, 45(32), 5770–5777. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.07.018>
- Veefkind, J. P., Aben, I., McMullan, K., Förster, H., de Vries, J., Otter, G., Claas, J., Eskes, H. J., de Haan, J. F., Kleipool, Q., van Weele, M., Hasekamp, O., Hoogeveen, R., Landgraf, J., Snel, R., Tol, P., Ingmann, P., Voors, R., Kruizinga, B., ... Levelt, P. F. (2012). TROPOMI on the ESA Sentinel-5 Precursor: A GMES mission for global observations of the atmospheric composition for climate, air quality and ozone layer applications. *Remote Sensing of Environment*, 120, 70–83. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2011.09.027>
- Venegas, L. E., & Mazzeo, N. A. (2006). Modelling of urban background pollution in Buenos Aires City (Argentina). *Environmental Modelling & Software*, 21(4), 577–586. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2004.08.013>
- Venegas, L. E., & Mazzeo, N. A. (2010). An ambient air quality monitoring network for Buenos Aires city. *International Journal of Environment and Pollution*, 40(1/2/3), 184. <https://doi.org/10.1504/IJEP.2010.030921>
- Verhoelst, T., Compernelle, S., Pinardi, G., Lambert, J.-C., Eskes, H. J., Eichmann, K.-U., Fjæraa, A. M., Granville, J., Niemeijer, S., Cede, A., Tiefengraber, M., Hendrick, F., Pazmiño, A., Bais, A., Bazureau, A., Boersma, K. F., Bognar, K., Dehn, A., Donner, S., ... Zehner, C. (2021). Ground-based validation of the Copernicus Sentinel-5P TROPOMI NO₂ measurements with the NDACC ZSL-DOAS, MAX-DOAS and Pandonia global networks. *Atmospheric Measurement Techniques*, 14(1), 481–510. <https://doi.org/10.5194/amt-14-481-2021>
- Visser, A. (2016). *Simulating nitrogen oxides chemistry in Europe using a complex chemistry scheme in WRF-Chem*. Wageningen University and Research Centre.
- Vivanco, M. G., & Andrade, M. de F. (2006). Validation of the emission inventory in the Sao Paulo Metropolitan Area of Brazil, based on ambient concentrations ratios of CO, NMOG and NO_x and on a photochemical model. *Atmospheric Environment*, 40(7), 1189–1198. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.10.041>
- Wang, C., Wang, T., Wang, P., & Wang, W. (2022). Assessment of the Performance of TROPOMI NO₂ and SO₂ Data Products in the North China Plain: Comparison, Correction and Application. *Remote Sensing*, 14(1), 214. <https://doi.org/10.3390/rs14010214>
- Wang, X., Liang, X.-Z., Jiang, W., Tao, Z., Wang, J. X. L., Liu, H., Han, Z., Liu, S., Zhang, Y., & Grell, G. A. (2010). WRF-Chem simulation of East Asian air quality: Sensitivity to temporal and vertical emissions distributions. *Atmospheric Environment*, 44(5), 660–669. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.11.011>
- Wang, Y. J., DenBleyker, A., McDonald-Buller, E., Allen, D., & Zhang, K. M. (2011). Modeling the chemical evolution of nitrogen oxides near roadways. *Atmospheric Environment*, 45(1), 43–52. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.09.050>

- Wesely, M. L. (1989). Parameterization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models. *Atmospheric Environment (1967)*, 23(6), 1293–1304. [https://doi.org/10.1016/0004-6981\(89\)90153-4](https://doi.org/10.1016/0004-6981(89)90153-4)
- Wicker, L. J., & Skamarock, W. C. (2002). Time-Splitting Methods for Elastic Models Using Forward Time Schemes. *Monthly Weather Review*, 130(8), 2088–2097. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(2002\)130<2088:TSMFEM>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(2002)130<2088:TSMFEM>2.0.CO;2)
- Wiedinmyer, C., Akagi, S. K., Yokelson, R. J., Emmons, L. K., Al-Saadi, J. A., Orlando, J. J., & Soja, A. J. (2011). The Fire INventory from NCAR (FINN): a high resolution global model to estimate the emissions from open burning. *Geoscientific Model Development*, 4(3), 625–641. <https://doi.org/10.5194/gmd-4-625-2011>
- Wiedinmyer, C., & Neff, J. C. (2007). Estimates of CO₂ from fires in the United States: implications for carbon management. *Carbon Balance and Management*, 2(1), 10. <https://doi.org/10.1186/1750-0680-2-10>
- Wild, O., Zhu, X., & Prather, M. J. (2000). Fast-J: Accurate Simulation of In- and Below-Cloud Photolysis in Tropospheric Chemical Models. *Journal of Atmospheric Chemistry*, 37, 245–282. <https://doi.org/10.1023/A:1006415919030>
- Wuebbles, D. J., & Sanyal, S. (2015). Air Quality in a Cleaner Energy World. *Current Pollution Reports*, 1(2), 117–129. <https://doi.org/10.1007/s40726-015-0009-x>
- Yadav, I. C., & Devi, N. L. (2019). Biomass Burning, Regional Air Quality, and Climate Change. In *Encyclopedia of Environmental Health* (pp. 386–391). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409548-9.11022-X>
- Yarwood, G., Morris, R. E., & Wilson, G. M. (2007). Particulate Matter Source Apportionment Technology (PSAT) in the CAMx Photochemical Grid Model. In *Air Pollution Modeling and Its Application XVII* (pp. 478–492). Springer US. https://doi.org/10.1007/978-0-387-68854-1_52
- Ying, Z., Tie, X., & 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), 851–859. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.10.044>
- Zaveri, R. A., Easter, R. C., Fast, J. D., & Peters, L. K. (2008). Model for Simulating Aerosol Interactions and Chemistry (MOSAIC). *Journal of Geophysical Research*, 113(D13), D13204. <https://doi.org/10.1029/2007JD008782>
- Zaveri, R. A., & Peters, L. K. (1999). A new lumped structure photochemical mechanism for large-scale applications. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 104(D23), 30387–30415. <https://doi.org/10.1029/1999JD900876>
- Zhang, Y., Fu, R., Yu, H., Dickinson, R. E., Juarez, R. N., Chin, M., & Wang, H. (2008). A regional climate model study of how biomass burning aerosol impacts land-atmosphere interactions over the Amazon. *Journal of Geophysical Research*, 113(D14), D14S15. <https://doi.org/10.1029/2007JD009449>
- Zheng, Y., Alapaty, K., Herwehe, J. A., Del Genio, A. D., & Niyogi, D. (2016). Improving High-Resolution Weather Forecasts Using the Weather Research and Forecasting (WRF) Model

with an Updated Kain–Fritsch Scheme. *Monthly Weather Review*, 144(3), 833–860. <https://doi.org/10.1175/MWR-D-15-0005.1>

Zhong, M., Saikawa, E., Liu, Y., Naik, V., Horowitz, L. W., Takigawa, M., Zhao, Y., Lin, N.-H., & Stone, E. A. (2016). Air quality modeling with WRF-Chem v3.5 in East Asia: sensitivity to emissions and evaluation of simulated air quality. *Geoscientific Model Development*, 9(3), 1201–1218. <https://doi.org/10.5194/gmd-9-1201-2016>

Ziska, F., Quack, B., Abrahamsson, K., Archer, S. D., Atlas, E., Bell, T., Butler, J. H., Carpenter, L. J., Jones, C. E., Harris, N. R. P., Hepach, H., Heumann, K. G., Hughes, C., Kuss, J., Krüger, K., Liss, P., Moore, R. M., Orlikowska, A., Raimund, S., ... Yokouchi, Y. (2013). Global sea-to-air flux climatology for bromoform, dibromomethane and methyl iodide. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 13(17), 8915–8934. <https://doi.org/10.5194/acp-13-8915-2013>

Anexo A. Contribuciones en otros trabajos científicos relacionados

A.1 Pasantía de investigación IQFR-CSIC (España).

En el transcurso de la presente tesis se realizó una estancia de investigación en el Instituto de Química Física Rocasolano del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (IQFR-CSIC) en Madrid, España. La visita se llevó a cabo en el marco del programa I-Coop+ centrado en el estudio de la química de los halógenos VSL a partir del acoplamiento entre el modelo atmosférico global CAM-Chem y el modelo regional WRF-Chem. Durante la estadía, se han aprendido las bases técnicas para la implementación/modificación de un mecanismo de reacción atmosférica en WRF-Chem utilizando KPP. En particular, el instituto ha trabajado en la ampliación del mecanismo MOZART-MOSAIC para incluir una descripción completa de las fuentes de emisión, la fotoquímica de los halógenos en fase gaseosa y el reciclaje heterogéneo de especies como el Br, el I y el Cl. En este sentido, como parte de la estancia, he podido capacitarme en los procedimientos para:

- Compilar en el clúster TOKO la versión del modelo con el mecanismo MOZART-MOSAIC modificado con la implementación de la química de halógenos.
- Generar los archivos `wrfocean_d<dominio>` que contienen las concentraciones de halocarbonos oceánicos tomados de Ziska et al. (2013), redimensionados en la misma proyección cartográfica de los dominios de simulación de WRF-Chem.
- Compilar la herramienta `megan bio emiss`, modificada para utilizar los archivos `wrfocean_d<dominio>` como archivo de entrada adicional para incluir las emisiones oceánicas de halocarbonos, junto con el cálculo de las emisiones biogénicas continentales en la simulación.
- Generar las condiciones iniciales y de contorno para varios compuestos halogenados utilizando una versión de CAM-Chem con la química de halógenos habilitada (Fernandez et al., 2014)

Como resultado de dicha interacción se pudo colaborar en la elaboración de los siguientes trabajos:

- Li, Q., Badia, A., Fernandez, R. P., Mahajan, A. S., **López-Noreña, A. I.**, Zhang, Y., Wang, S., Puliafito, E., Cuevas, C. A., & Saiz-Lopez, A. (2021). Chemical Interactions Between Ship-Originated Air Pollutants and Ocean-Emitted Halogens. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 126(4). <https://doi.org/10.1029/2020JD034175> (**Artículo publicado en revista con referato**)
- Li, Q., Badia, A., Fernandez, R. P., Mahajan, A. S., **López-Noreña, A. I.**, Zhang, Y., Wang, S., Puliafito, E., Cuevas, C. A., & Saiz-Lopez, A. (2021). Chemical interactions between ship-originated air pollutants and ocean-emitted halogens. *EGU General Assembly online*, 19–30 Apr, EGU21-10827, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-10827>, 2021. (**Trabajo publicado en congreso internacional**)

Resumen: Los buques de navegación marítima suministran productos de una región a otra y contribuyen a la economía mundial. Los gases de escape de los buques contienen muchos contaminantes atmosféricos y provocan importantes cambios en la composición de la atmósfera marina. El papel de las especies halógenas reactivas (RHS) en la troposfera ha recibido un reconocimiento cada vez mayor y los océanos son los mayores contribuyentes a su carga atmosférica. Sin embargo, no se ha estudiado en detalle el impacto de las emisiones del transporte marítimo en las RHS ni el de éstas en los contaminantes atmosféricos originados por los buques. Aquí se utiliza una versión modificada del modelo WRF-Chem para explorar las interacciones químicas entre las emisiones de los barcos y los RHS oceánicos sobre los mares de Asia Oriental en verano. Las emisiones y las transformaciones químicas resultantes de las actividades marítimas aumentan el nivel de NO y NO₂ en la superficie, aumentan el O₃ en el Mar de China Meridional, pero disminuyen el O₃ en el Mar de China Oriental. Estos cambios en los contaminantes dan lugar a notables cambios en los niveles de RHS (aumento de >200% del cloro; disminución de ~30% y ~5% del bromo y el yodo, respectivamente), así como en su particionado. Los abundantes RHS, a su vez, reconfiguran las cargas de los contaminantes atmosféricos (~20% de disminución de NO y NO₂; ~15% de disminución de O₃) y las de los oxidantes (>10% de reducción de OH y HO₂; ~40% de disminución de NO₃) con marcados patrones a lo largo de las vías de los buques. Por lo tanto, sugerimos que estas importantes interacciones químicas de las emisiones originadas por los buques con la RHS deben ser consideradas en las evaluaciones de política ambiental del papel de las emisiones del transporte marítimo en la calidad del aire y el clima.

Tabla A.1. Comparación de los valores históricos observados, con las concentraciones simuladas (media mensual) de O₃, NO₂, CO, IO, CHBr₃, CH₂Br₂, CHBr₂Cl, obtenidas para los tres casos de simulación: FULL: considerando la química de los halógenos, las emisiones oceánicas y las emisiones antropogénicas del transporte marítimo; NO-HAL: desactivando las emisiones oceánicas; NO-SHIP: desactivando las emisiones del transporte marítimo (Tabla S1, Li et al., 2021)

Location (Reference)	Period	Species	Observation ^a	NO-SHIP ^b	NO-HAL ^b	FULL ^b
East China Sea (Hatakeyama et al. 2004)	Mar, 2001	O ₃	62.9 to 86.4 ppbv (flight average at 400m)	22.5 (49.7)	28.4 (54.9)	21.9 (49.4)
		NO ₂	270 to 430 pptv (daytime average<1000m)	371.8 (869.6)	421.4 (904.4)	386.2 (943.6)
West Pacific (Jacob et al. 2003; Carmichael et al. 2003)	Mar, 2001	O ₃	51.1 to 55.5 ppbv (daytime average<1000m)	30.0 (40.2)	34.1 (45.0)	29.9 (40.2)
		CO	218.8 to 235.3 ppbv (daytime average<1000m)	86.2 (132.1)	83.9 (130.2)	86.2 (131.8)
South China Sea (Schreier et al. 2015)	Nov, 2011	NO ₂	<30 pptv (average in MBL)	32.2 (165.1)	102.5 (228.2)	78.0 (229.4)
East China Sea (Tan et al., 2018)	Jun, 2017	NO ₂	<3000 to >10000 pptv (average)	59.8 (299.8)	523.6(1093.3)	359.7(873.4)
		NO ₂	2300±1200 pptv (average)	300.0 (1310.2)	610.2(1505.8)	546.9(1490.3)
		O ₃	21±7.3 ppbv (average)	18.5 (33.1)	23.8 (41.0)	18.8 (33.9)
Northern South China Sea (Lan et al., 2015)	Mar, 2010	CO	170±7.3 ppbv (average)	76.3 (115.9)	74.3 (115.7)	75.7 (116.6)
		NO ₂	4000±1300 to 5300 ±5600 pptv (average)	227.2 (5882.5)	717.7 (5965.4)	614.9 (5987.9)
		O ₃	21±8.0 to 41±11.5 ppbv(average)	21.7 (45.8)	27.3 (58.9)	21.9 (45.5)
Taiwan Strait (Lan et al., 2015)	Apr, 2010; Jul, 2010	CO	145±50 to 286±34 ppbv (average)	59.0 (140.1)	56.1 (123.8)	58.3 (126.3)
		BrO	0.15 to 1.7 pptv (daytime flight average< 500 m)	0.96 (7.0)	-	0.45 (1.4)
		IO	0.7 to 1.4 pptv (daytime flight average in MBL)	0.76 (1.6)	-	0.68 (1.3)
West Pacific (Koenig et al., 2017)	Jan-Feb, 2014	BrO	0.15 to 1.7 pptv (daytime flight average< 500 m)	0.96 (7.0)	-	0.45 (1.4)
West Pacific (Großmann et al., 2013)	Oct, 2009	IO	0.7 to 1.4 pptv (daytime flight average in MBL)	0.76 (1.6)	-	0.68 (1.3)
Global (Prados-Roman et al., 2015)	2008-2013	IO	0.4 to 1.4 pptv (daytime average at surface)	1.4 (4.2)	-	1.2 (2.6)
East Chin Sea and West Pacific (Liu et al. 2020)	Sep, 2017; Oct-Dec, 2018	CHBr ₃	0.3 to 4.9 pptv (average)	0.12 (0.23)	-	0.12 (0.23)
		CH ₂ Br ₂	0.2 to 7.5 pptv (average)	0.13 (0.24)	-	0.13 (0.24)
		CHBr ₂ Cl	0.2 to 2.0 pptv (average)	0.04 (0.08)	-	0.04 (0.08)

A.2 Colaboración en otros proyectos del grupo GEAA-UTN

Los conocimientos y desarrollos alcanzados en los años iniciales de la presente tesis permitieron configurar una estructura del modelo WRF-Chem-KPP completamente funcional, que pudo ser implementada con éxito en los recursos computacionales disponibles de las instituciones GEAA-UTN (máquinas de escritorio) y FCEN-UNCUYO (clúster TOKO) de manera que los grupos de investigación de ambas instituciones tuvieran la configuración local optimizada considerando las mismas características locales y las mismas bases de datos de emisiones de alta resolución. Esta implementación supuso un avance para el grupo GEAA-UTN y me permitió apoyar el desarrollo y conclusión de la tesis doctoral de otros miembros del grupo que tenían una componente de simulación en su propuesta. Mi contribución en estos trabajos fue la configuración de WRF-Chem-KPP para cada uno de los casos de estudio, la ejecución de las respectivas simulaciones y el desarrollo de códigos de postprocesamiento para el análisis y presentación de los resultados en formato de imágenes y tablas. Las contribuciones realizadas incluyeron simulaciones de sensibilidad del modelo WRF-Chem-KPP ante diferentes parametrizaciones microfísicas, con diferentes mecanismos químicos y de aerosoles, y posteriormente un análisis adicional con la activación/desactivación de las emisiones por quema de biomasa, como se describe a continuación:

A.2.1 Impacto de las emisiones de aerosoles sobre las precipitaciones de los andes centrales

Pascual Flores, R. (2019). Impacto de las emisiones de aerosoles sobre las precipitaciones de los andes centrales. [Tesis Doctoral], Universidad Tecnológica Nacional- Facultad Regional Mendoza.

Resumen: El objetivo de este trabajo fue evaluar la influencia de los aerosoles antropogénicos en los patrones de precipitación. Para ello, como primer paso, se evaluó el desempeño de diferentes configuraciones del modelo meteorológico WRF para predecir la precipitación líquida y sólida en la región de los Andes Centrales. Estas simulaciones se compararon con las estadísticas de precipitación de la zona de estudio para validar la configuración óptima. El modelo WRF demostró su capacidad para reproducir eventos típicos de precipitación en un área con topografía y meteorología complejas. La configuración meteorológica optimizada se utilizó para efectuar simulaciones con el modelo WRF-Chem con el fin de realizar un análisis de sensibilidad con respecto a la inclusión de las emisiones antropogénicas en la simulación. Se examinaron escenarios en condiciones limpias (sin aerosoles) y en condiciones contaminadas a diferentes niveles (con inclusión e incremento de aerosoles) para eventos de precipitación típicos. Cuando se incluyeron en la simulación las emisiones antropogénicas sin modificar, se observó un ligero aumento en la cantidad de precipitación a escala local (aprox. 8%), mientras que cuando se simuló un aumento de la contaminación en áreas particulares del dominio de

simulación, se observaron disminuciones en la cantidad de precipitación (aprox. 60%), por lo que se determinó que el grado de impacto es probablemente sensible a la magnitud de la emisión. Además, se realizó un análisis con datos satelitales para evaluar el impacto de los incendios en los patrones de precipitación en Mendoza. Este análisis también demostró que cuanto mayores son las cargas de material particulado ($PM_{2.5}$) presentes en la atmósfera como consecuencia de los incendios en la zona, menores son los registros de precipitación acumulada. Además de las contribuciones realizadas en la tesis, los resultados parciales de se presentaron en el siguiente congreso:

- Pascual Flores, R., Bolaño-Ortiz, T., López Noreña, A. & S.E. Puliafito. (2018). Characterization of the spatio-temporal variation of atmospheric pollution. WRF-Chem simulations and analysis potential sources contribution on the Central Andes. *School of Atmospheric Measurements in Latin America and the Caribbean (SAMLAC): Reactive Gases and Aerosols*. Noviembre. San Juan, Puerto Rico. **(Presentación en congreso)**

A2.2 Evaluación de los aerosoles absorbentes en la reducción del albedo en nieve en la primavera austral de los Andes Centrales

Bolaño Ortiz, T. (2019). Evaluación de los aerosoles absorbentes en la reducción del albedo en nieve en la primavera austral de los Andes Centrales [Tesis Doctoral], Universidad Tecnológica Nacional- Facultad Regional Mendoza.

Resumen: Los cambios en el albedo en nieve (SA) en las cuencas Limari, Choapa, Aconcagua, Maipo, San Juan, Mendoza y Tunuyán en los Andes centrales se asocian con la posible deposición de partículas absorbentes de luz (LAP) en la primavera austral. En este trabajo, se relacionó el comportamiento del SA con los datos diarios de cobertura de nieve (SC), la profundidad óptica del aerosol (AOD) y la temperatura de la superficie terrestre (LST) disponibles de MODIS (Terra) durante 2000-2016, y con otros parámetros derivados como días después de nevadas (DAS) y la precipitación nívea (SP). Se utilizaron píxeles con 100% SC para obtener el valor promedio mensual de SA, LST, AOD, DAS y SP de septiembre a noviembre, y se realizó un análisis de regresión múltiple que ha mostrado representar adecuadamente el SA, evidenciando que los aumentos de aerosoles (AOD) pueden estar reduciendo el SA en los meses de primavera en 13.6, 8.6, 6.4, 4.6 y 3.8% en las cuencas Limari, Tunuyán, San Juan, Mendoza y Maipo respectivamente. En este trabajo se utilizaron simulaciones con el modelo WRF-Chem para demostrar que la distribución de carbono negro (BC) procedente de la quema de biomasa a cielo abierto en la región y el AOD promedio diario se asocian con una disminución del 10, 33 y 22% de SA en las cuencas San Juan, Mendoza y Tunuyán respectivamente, entre el 29 y el 30 de septiembre de 2016. Las concentraciones simuladas de BC se presentan desde el noreste, coincidiendo con una apreciable cantidad de focos de quema observados en imágenes del satélite VIIRS para estos días. Asimismo, se aplicó el modelo de trayectoria NOAA HYSPLIT que constató que las masas de aire con BC fueron arrastradas desde la fuente en dirección a las cuencas de San Juan, Mendoza y Tunuyán. Nuestros resultados sugieren que la disminución de SA debido a AOD, en el caso de estudio, se originó

debido al BC generado por las quemas del noreste que comúnmente se presentan en esa época del año en Argentina y Sudamérica, lo que produce un impacto negativo en la nieve y en los recursos hidrológicos que se generan en los Andes Centrales.

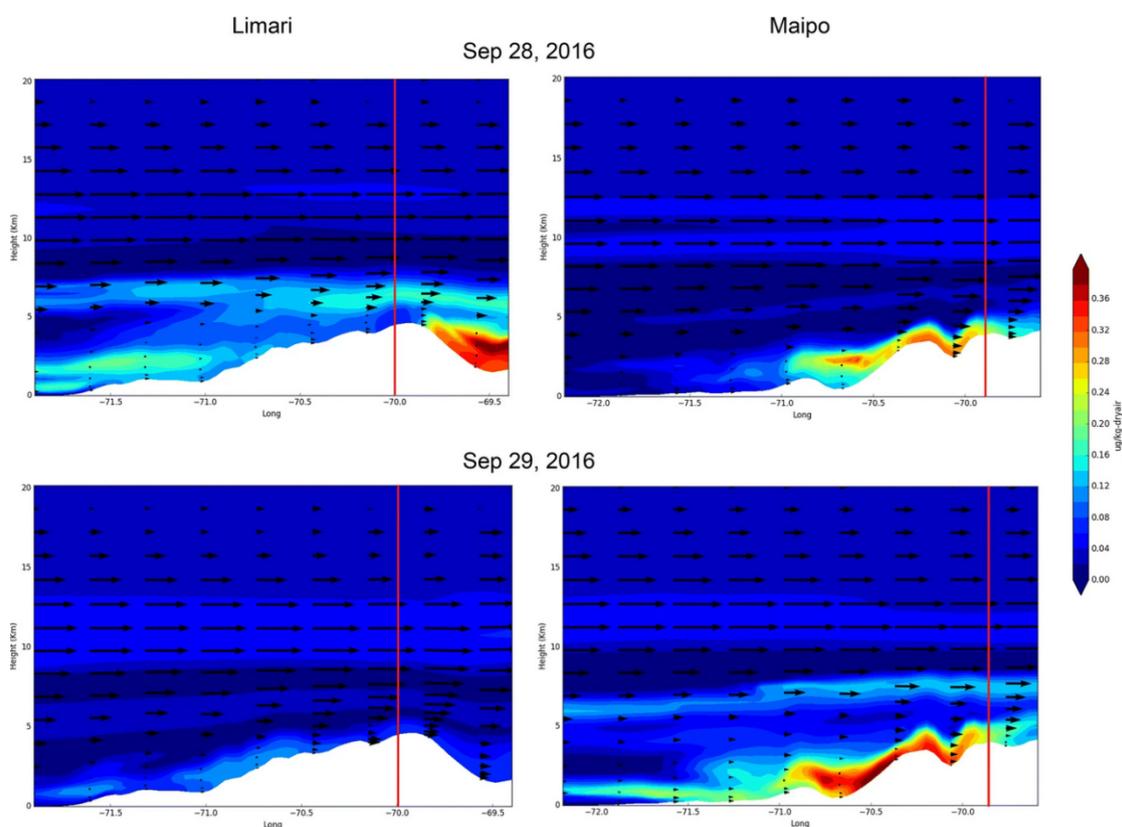


Figura A1. Salidas del modelo para la distribución latitudinal de los promedios diarios de BC para el 28 y 29 de septiembre de 2016, en las cuencas del Limarí y del Maipo (Figura 7, Bolaño-Ortiz et al., 2019).

Los resultados obtenidos se utilizaron posteriormente para la publicación de los siguientes trabajos:

- Puliafito, S.E., Ortiz, T. B., Pascual, R., **Lopez-Noreña A.**, & Berná, L. (2020). Snow Albedo Reduction in Central Andes by Atmospheric Aerosols: Case Study on the Tunuyán Basin (Argentina), *IEEE Latin American GRSS & ISPRS Remote Sensing Conference (LAGIRS)*, Santiago, Chile, 2020, pp. 548-553, <https://doi.org/10.1109/LAGIRS48042.2020.9165617>. **(Artículo publicado en revista con referato)**
- Bolaño-Ortiz, T. R., Pascual-Flores, R. M., **López-Noreña, A. I.**, Ruggeri, M. F., Lakkis, S. G., Fernández, R. P., & Puliafito, S. E. (2019). Assessment of absorbing aerosols on austral spring snow albedo reduction by several basins in the Central Andes of Chile from daily satellite observations (2000–2016) and a case study with the WRF-Chem model. *SN Applied Sciences*, 1(11), 1352. <https://doi.org/10.1007/s42452-019-1256-z> **(Artículo publicado en revista con referato)**
- Bolaño-Ortiz, T. R., Pascual-Flores, R. M., **López-Noreña, A. I.**, Ruggeri, M. F., Lakkis, S. G. & Puliafito, S. E. (2019). Effect of biomass burning on Light-Absorbing Particles (LAP) vs. snow albedo reduction on Central Andes: the analysis of WRF-Chem modeling. (Poster). *The 2019 Meteorology and Climate - Modeling for Air Quality Conference*, Davis, CA. USA Affiliation:

University of California, Davis. <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.27741.15847> (**Presentación en congreso**)

- Bolaño-Ortiz, T. R., Ruggeri, M. F., Pascual-Flores, R. M., **López-Noreña, A. I.**, Lakkis, S. G., & Puliafito, S. E. (2019). Análisis de los aerosoles absorbentes generados por quema de biomasa y su relación con la reducción de albedo en nieve en la Cuenca del Maipo (Chile): Estudio de caso usando el modelo WRF- Chem. *Reunión anual de la Sociedad Chilena de la Criósfera, Centro de Estudios Avanzados en Zonas Áridas*. La Serena, Chile (**Presentación en congreso**)

A.3 Otras publicaciones

A continuación, se recopilan otros trabajos, presentados en revistas científicas internacionales, congresos y reuniones nacionales/internacionales relevantes que me han permitido adquirir experiencia en el modelado global, regional y urbano. Además de varias colaboraciones dentro de las líneas de investigación del director y codirector de esta tesis que han contribuido de una u otra manera en el desarrollo tanto de mi investigación como de mi crecimiento profesional.

A.3.1 Artículos publicados en revistas con referato

- Puliafito, S. E., Bolaño-Ortiz, T. R., Fernandez, R. P., Berná, L. L., Pascual-Flores, R. M., Urquiza, J., **López-Noreña, A. I.**, & Tames, M. F. (2021). High-resolution seasonal and decadal inventory of anthropogenic gas-phase and particle emissions for Argentina. *Earth System Science Data*, 13(10), 5027–5069. <https://doi.org/10.5194/essd-13-5027-2021>
- Fernandez, R. P., Barrera, J. A., **López-Noreña, A. I.**, Kinnison, D. E., Nicely, J., Salawitch, R. J., et al. (2021). Intercomparison between surrogate, explicit and full treatments of VSL bromine chemistry within the CAM-Chem chemistry-climate model. *Geophysical Research Letters*, 48, e2020GL091125. <https://doi.org/10.1029/2020GL091125>
- Bolaño-Ortiz, T. R., Pascual-Flores, R.M., Puliafito, S. E., Camargo-Cacedo, Y., Berná-Peña, L. L., Ruggeri, M.F, **Lopez-Noreña, A.I**, Tames, M.F., & Cereceda- Balic, F., (2020). Spread of COVID-19, Meteorological Conditions and Air Quality in the City of Buenos Aires, Argentina: Two Facets Observed during Its Pandemic Lockdown. *Atmosphere* 11, no. 10: 1045. <https://doi.org/10.3390/atmos11101045>
- Puliafito, S. E., Berná-Peña, L., **Lopez-Noreña, A.I**, Pascual, R. & Bolaño-Ortiz, T.R. (2020). Atmospheric Methane Emissions for Argentina. Comparison with TROPOMI Satellite Measurements. *IEEE Latin American GRSS & ISPRS Remote Sensing Conference (LAGIRS)*, Santiago, Chile, 2020, pp. 527-532. <https://doi.org/10.1109/LAGIRS48042.2020.9165602>.

A.3.2 Trabajos publicados en congresos nacionales e internacionales

- **Lopez-Noreña, A. I.**, Berná, L., Tames, M. F., Millán, E., Puliafito, E., & Fernandez, R. P. (2021). Evaluation of NO₂, O₃, PM₁₀, and PM_{2.5} in the city of Buenos Aires, Argentina using WRF-Chem model. *EGU General Assembly, online*, 19–30 Apr, EGU21-1514, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-1514>, 2021.
- Fernandez, R. P., Reynoso, A., Maldonado, A., Tomazzeli, O., Cremades, P., Berná, L., **Lopez Noreña, A. I.**, Cuevas, C., Li, Q., & Saiz-Lopez, A. (2022). Spatial and temporal variability of

inorganic halogen sources and sinks over the marine boundary layer and free troposphere. *EGU General Assembly, online, Austria, 23–27 May, EGU22-5165, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu22-5165>, 2022.*

- Berná, L., **Lopez-Noreña, A. I.**, Puliafito, E., Barrera, J. A., Engel, A., Jesswein, M., Cuevas, C. A., Saiz-Lopez, A. & Fernandez, R. P. (2022). Evaluation of CAM-Chem VSLBr model performance during SouthTRAC campaign. *EGU General Assembly, online, 19–30 Apr, EGU21-2298, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-2298>, 2021.*
- Berná, L., **López-Noreña, A. I.**, Tames, M. F., Urquiza, J, & Puliafito, S. E. (2022). Impacto de la asimilación de datos satelitales de humedad de suelo y de la siembra de nubes sobre tormentas convectivas severas de granizo del centro-oeste de Argentina en simulaciones de WRF. *Congreso VIII PROIMCA - VI PRODECA, Villa María, Córdoba, 22-24 de junio. Publicado como artículo completo en libro "Contaminación Atmosférica e Hídrica en Argentina - Tomo VI", con ISBN 978-987-4998-93-4.*
- Bolaño-Ortiz, T; Pascual-Flores, R; **López-Noreña, A**; Ruggieri, M. F; Lakkis, S & Puliafito, S. (2019). Avances en el estudio de impacto de partículas absorbentes de luz en la reducción de albedo en nieve de los andes centrales. (Poster) *Contaminación Atmosférica e Hídrica en Argentina Tomo V: Contribuciones del VII Congreso PROIMCA y V Congreso PRODECA, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Rafaela, 7-9 agosto, Rafaela, Argentina. ISBN 978-987-4998-41-5*
- Puliafito, E., Pascual-Flores, R., Bolaño-Ortiz, T., & **Lopez-Noreña, A.** (2019). Inventario de alta resolución de las emisiones de metano del sector de agricultura y ganadería. *Contaminación Atmosférica e Hídrica en Argentina Tomo V: Contribuciones del VII Congreso PROIMCA y V Congreso PRODECA, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Rafaela, 7-9 agosto, Rafaela, Argentina. ISBN 978-987-4998-41-5*
- **Lopez-Noreña, A.**, Puliafito E, & Fernández, R. (2019a). Especiación de inventarios de emisiones de aerosoles y compuestos orgánicos volátiles para el modelo WRF-Chem aplicado a los esquemas RADM-2, CBM-Z y MOZART-4", *Contaminación Atmosférica e Hídrica en Argentina Tomo V: Contribuciones del VII Congreso PROIMCA y V Congreso PRODECA, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Rafaela, 7-9 agosto, Rafaela, Argentina. ISBN 978-987-4998-41-5*
- Schiavone, J., Fernández, R., **López Noreña, A.**, Santos, J., Puliafito, S. (2017a). Desarrollo de una Herramienta de Redimensionamiento Espacial y Temporal de Emisiones Naturales y Antropogénicas. *Congreso Bianual VI PROIMCA - IV PRODECA, Ponencia, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Bahía Blanca, 6-8 septiembre, Bahía Blanca, Argentina. ISBN 978-987-1896-84-4 (versión digital). http://www.edutecne.utn.edu.ar/prodeca-proimca/proimca2017_trabajos.html*
- Fernandez, R., Schiavone, F., Cremades, P., **Lopez Noreña A.**, & Puliafito, E. (2017). Development of a New Spatial and Temporal resizing Tool of Natural and Anthropogenic Emissions for use in WRF/Chem Regional Modeling. *Geophysical Research Abstracts Vol. 19, p.5715, EGU2017-5716, 2017 EGU General Assembly, 23–28 Abril, Vienna, Austria. <https://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2017/EGU2017-5716.pdf>*

A.3.3 Presentaciones en congresos y conferencias internacionales

- **Lopez-Noreña, A.**, Berná L, Puliafito E., & Fernández, R. (2020). Evaluation of WRF-Chem performance in the Air Quality modeling over Metropolitan Area of Buenos Aires: inter-

comparison of global vs. local emission inventories. Online webinar presentation. *19th Global Emissions Initiative and Accelerating social transformations (GEIA) Conference*. Junio.

- Bolaño-Ortiz, T.R., Pascual-Flores, R.M., **López-Noreña, A.I.**, Ruggeri, MF., Lakkis, G., & Puliafito, S. E. (2019). Analysis of teleconnection between the Arctic Oscillation and South American cryosphere reduction. *3rd PACES Open Science Meeting*, Oslo - Norway from 18 to 20 September <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.25966.56647>
- **Lopez-Noreña, A.**, Li, Q., Badia, A., Berná, L., Puliafito, E., Saiz-Lopez, A., & Fernández, R. (2019b). Evaluating the regional impacts of anthropogenic and natural emissions over South America. (Poster). *The Chemistry Climate Model Initiative (CCMI) Science Workshop*, The Chinese University of Hong Kong (CUHK), Hong Kong, Agosto 7-9.
- **Lopez-Noreña, A.**, Schiavone, J., Cremades, P., Puliafito, S. E., & Fernandez, R. (2018). Impact of Natural and Anthropogenic Emissions on the Regional Air Quality in South America. (Poster). *Université Grenoble- Alpes y Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS)*. Edificio IGE/LGGE de la Universidad de Grenoble, 12 de enero, Francia

A.3.4 Presentaciones en congresos y conferencias a nivel nacional/provincial

- Tames, M.F., Urquiza, J., Berná Peña, L., **Lopez Noreña, A.I.**, & Puliafito, S.E. (2022). Estimación de la exposición a PM_{2.5} basada en la movilidad en el área metropolitana de Mendoza. (Poster). *XIV Congreso Argentino de Meteorología (CONGREGMET)*. Buenos Aires, Argentina, 7 al 11 de noviembre.
- Fernández, R., Cremades, P., **López Noreña, A.**, Barrera, J., Schiavone, J., Bolaño-Ortiz, T., & Puliafito, E. (2018). Modelado de la Calidad de Aire regional en América del Sur utilizando WRF-Chem: Incorporación de Inventarios de Emisión y Condiciones de Borde Locales para Argentina. (Poster). *XXV Jornadas de Investigación de la UNCuyo*. Mendoza, Argentina, 8 y 9 de noviembre.
- Barrera, J., Fernández, R., Cremades, P., **López Noreña, A.**, & Toselli B. (2018). Variación estacional del impacto de sustancias biogénicas bromadas de tiempo de vida corto sobre la evolución del ozono estratosférico durante el siglo XXI. (Poster). *XXV Jornadas de Investigación de la UNCuyo*. Mendoza, Argentina, 8 y 9 de noviembre.
- Fernández, R., **López Noreña, A.**, Pascual, R., Bolaño-Ortiz, T., & Puliafito E. (2018). Aplicación de WRF- CHEM en modelos de calidad del aire en América del Sur: incorporación de inventarios de emisión y condiciones de borde globales vs. locales. (Poster). *XIII Congreso Argentino de Meteorología (CONGREGMET)*. Rosario, Argentina, 16 al 19 de octubre.
- Fernández, R., Barrera, J., **López Noreña, A.**, & Saiz-López A. (2018). Impacto de las sustancias biogénicas bromadas de tiempo de vida corto, sobre la evolución de la columna total de ozono durante el siglo XXI. (Poster). *XIII Congreso Argentino de Meteorología (CONGREGMET)*. Rosario, Argentina, 16 al 19 de octubre.
- Pascual, R., Bolaño-Ortiz, T., Ruggeri, F., **López Noreña, A.**, Fernández, R. y E. Puliafito. (2018). Análisis de la relación entre la deposición potencial de aerosoles atmosféricos y el caudal del río Mendoza en la subcuenca Tupungato en la provincia de Mendoza, Argentina (Poster). *XIII Congreso Argentino de Meteorología (CONGREGMET)*. Rosario, Argentina, 16 al 19 de octubre.
- Schiavone, J., **Lopez, A.**, & Fernandez, R. (2017b) Desarrollo de una Herramienta de Redimensionamiento Espacial y Temporal de Emisiones Naturales y Antropogénicas. (Poster).

Pre- Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Asociación de Universidades Grupo Montevideo (AUGM), 29 junio, Mendoza, Argentina.

Anexo B. Comparación entre los valores simulados y observados de las especies PM₁₀ y NO₂ para las estaciones de monitoreo Córdoba, Centenario y La Boca

Tabla B1. Comparación estadística de las series de tiempo horarias de las concentraciones de PM₁₀ y NO₂ simuladas en superficie vs. Observaciones en las estaciones Córdoba, Centenario y La Boca, y el promedio CBC durante el periodo de simulación

Estación	Observación Prom (std)	Simulación	Modelación Prom (std)	r	MB	MFB	MFE	Datos Faltantes
NO ₂	CBC	GEAAprf	47.3 (14.5)	0.335	7.3	17.3	34.7	-
		GEAAnp	54.8 (16.6)	0.302	14.8	31.6	38.9	
		EDGARnp	52.0 (17.1)	0.378	12.0	25.6	36.8	
	Córdoba	GEAAprf	47.1 (18.3)	-0.010	14.6	40.4	66.6	191 (42%)
		GEAAnp	54.0 (18.8)	-0.127	21.5	54.4	70.7	
		EDGARnp	54.4 (17.6)	0.167	21.8	56.3	65.6	
	Centenario	GEAAprf	40.2 (17.2)	0.302	2.3	1.0	41.6	5 (1%)
		GEAAnp	48.9 (16.8)	0.247	11.0	23.0	38.7	
		EDGARnp	50.3 (16.2)	0.297	12.4	26.7	39.3	
La Boca	GEAAprf	53.8 (15.6)	0.358	7.9	18.4	34.5	88 (19%)	
	GEAAnp	61.2 (18.8)	0.371	15.3	30.5	37.9		
	EDGARnp	51.9 (19.3)	0.476	6.04	12.3	30.6		
PM ₁₀	CBC	GEAAprf	14.5 (6.8)	-0.055	-15.8	-54.0	72.7	-
		GEAAnp	18.0 (8.4)	-0.049	-12.4	-46.1	61.7	
		EDGARnp	30.5 (14.7)	-0.069	0.1	-0.9	53.5	
	Córdoba	GEAAprf	14.5 (6.8)	-0.197	-15.7	-61.5	74.6	22 (5%)
		GEAAnp	17.9 (8.5)	-0.202	-12.2	-43.8	64.9	
		EDGARnp	29.3 (14.4)	-0.154	-0.9	-3.0	57.5	
	Centenario	GEAAprf	12.9 (6.7)	0.130	-10.5	-53.0	66.4	1
		GEAAnp	15.5 (8.2)	0.144	-7.9	-37.5	58.3	
		EDGARnp	31.3 (14.3)	0.113	7.8	26.2	53.7	
La Boca	GEAAprf	16.0 (7.1)	-0.030	-20.9	-61.8	73.8	0	
	GEAAnp	20.4 (9.2)	-0.017	-16.6	-42.4	63.3		
	EDGARnp	30.3 (15.4)	-0.056	-6.7	-11.0	60.8		

^aPromedio (Prom.) y desviación estándar (std) de NO₂ y PM₁₀ se expresan en µg m⁻³. El MB tiene las mismas unidades que su especie correspondiente. El MFB y MFE se expresan en porcentaje (%). El r es una variable adimensional

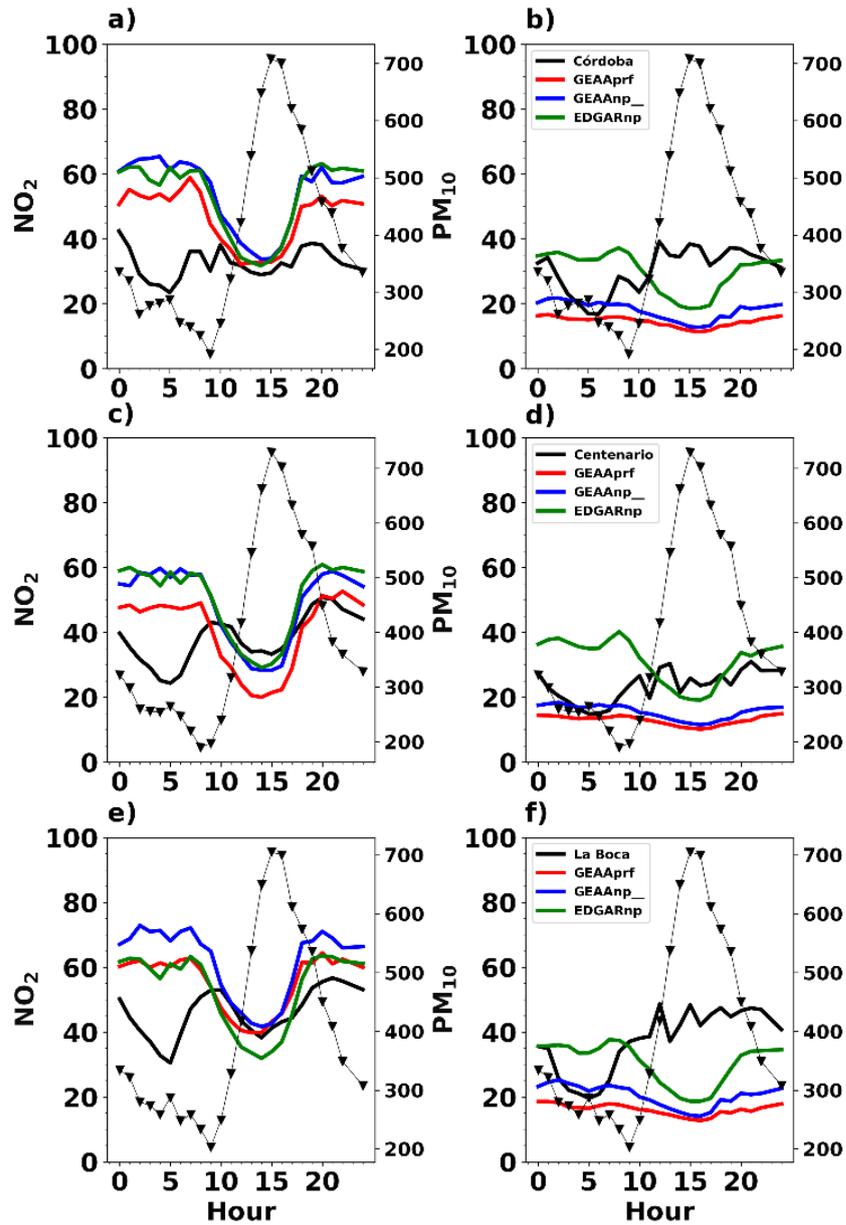


Figura B1. Ciclos diarios promedio en cada sitio de medición para las concentraciones superficiales de: a) NO₂ y b) PM₁₀ en la estación Córdoba; c) NO₂ y d) PM₁₀ en la estación Centenario; y e) NO₂ y f) PM₁₀ en la estación La Boca (eje izquierdo, $\mu\text{g m}^{-3}$), para todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). Las observaciones se muestran en línea negra. La línea negra con triángulos hacia abajo indica la altura de la PBL simulada (eje derecho) en metros (m). (Elaboración propia)

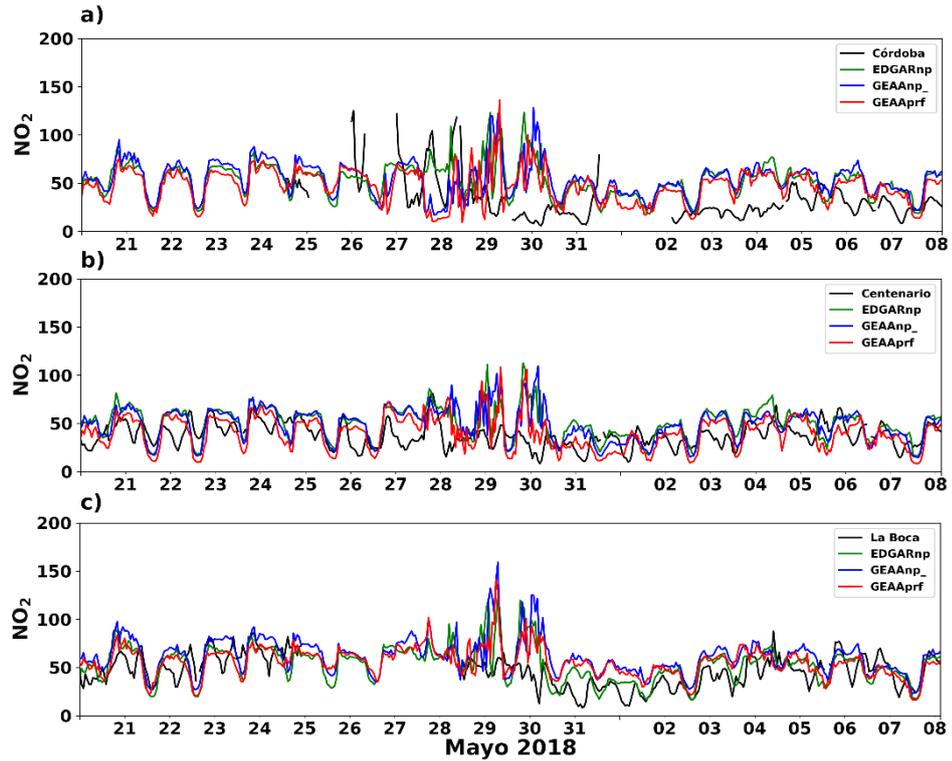


Figura B2. Series temporales horarias de las concentraciones superficiales de NO_2 ($\mu\text{g m}^{-3}$) en cada sitio de medición: a) Córdoba b) Centenario y c) La Boca, para las observaciones (negro) y todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). (Elaboración propia)

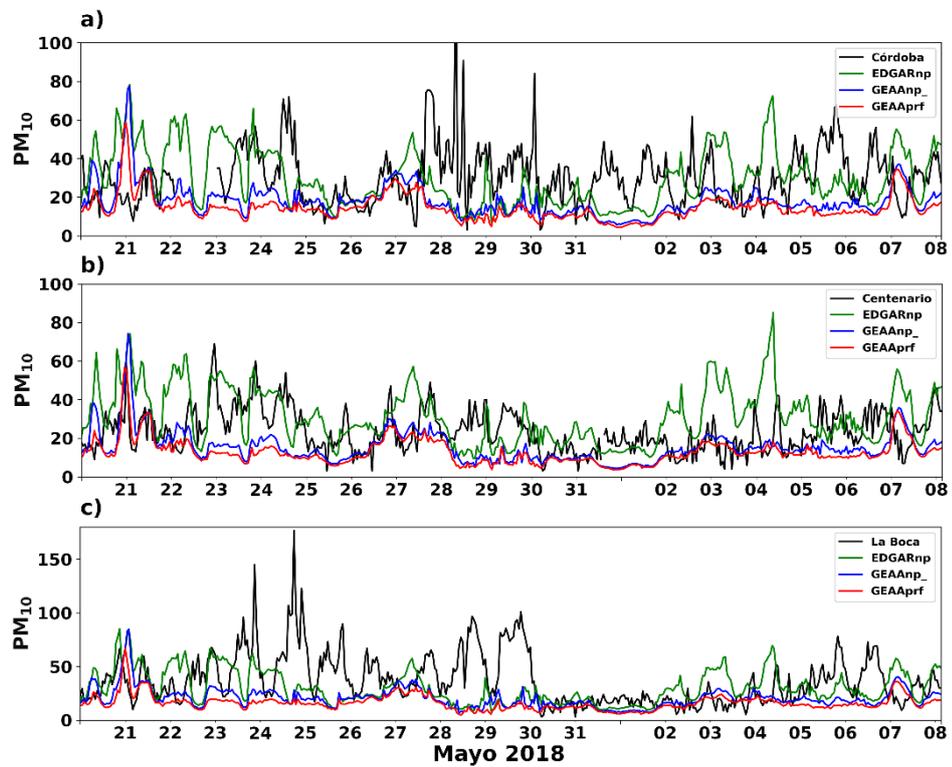


Figura B3. Series temporales horarias de las concentraciones superficiales de PM_{10} ($\mu\text{g m}^{-3}$) en cada sitio de medición: a) Córdoba b) Centenario y c) La Boca, para las observaciones (negro) y todas las simulaciones: EDGARnp (verde), GEAAnp (azul) y GEAAprf (rojo). (Elaboración propia)