

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

SCHIAVONE, JUAN F.^{1*}; FERNANDEZ, RAFAEL P.^{1,2,3}; LOPEZ NOREÑA, ANA I.^{2,3}; SANTOS, JORGE R.¹ Y PULIAFITO, SALVADOR E.^{2,3}

1: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad Nacional de Cuyo (FCEN/UNCuyo) – Argentina
e-mail: fschiavone804@gmail.com

2: Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) - Argentina
e-mail: rpfernandez@uncu.edu.ar

3: Facultad Regional Mendoza
Universidad Tecnológica Nacional (UTN-FRMendoza) - Argentina

Resumen. *Los procesos físicos y químicos atmosféricos pueden simularse con diferentes grados de complejidad usando modelos de transporte químicos globales (CAM-Chem) y regionales (WRF-Chem). Este trabajo presenta el desarrollo de una nueva herramienta de redimensionamiento espacial y temporal de emisiones naturales y antropogénicas orientada a adaptar los inventarios de emisiones globales utilizados en CAM-Chem a los requisitos técnicos del modelo regional WRF-Chem. Esta herramienta, basada en el preprocesador anthro_emiss de NCAR, permite interpolar y/o promediar espacialmente cualquier inventario de emisiones locales o globales a un dominio WRF-Chem definido por el usuario (incluyendo dominios anidados). También permite introducir una variación horaria del flujo de emisión superficial considerando el Ángulo Zenital (SZA) y la Zona Horaria sobre mapas políticos de alta resolución (para fuentes antropogénicas) o campos geofísicos tierra/océano (para fuentes naturales). Se presentan resultados para la adaptación de dos inventarios de emisiones diferentes en un dominio regional anidado de América del Sur (con resolución espacial de 36x36, 12x12 y 4x4 km²). También se comparan los resultados obtenidos para la base de datos global de EDGAR v4.2 (0,1°x0,1°) y un inventario local de emisiones vehiculares de gases de efecto invernadero para Argentina (2,5x2,5 km²), analizando diferentes perfiles diurnos de fuentes naturales y antropogénicas.*

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

1. INTRODUCCIÓN

El modelado computacional de la química atmosférica es un problema altamente complejo, que precisa de la representación conjunta de fenómenos meteorológicos (velocidad y dirección del viento, turbulencia, intercambios de calor, radiación, generación de aerosoles, etc.) y procesos químicos (emisión, deposición seca y húmeda, transporte, fotoquímica, química heterogénea, etc.) (Jacobson, 2005), ya que en la atmósfera real los procesos físicos y químicos están altamente acoplados y ocurren simultáneamente.

En los últimos años se han desarrollado complejos modelos regionales y globales que

incluyen la interacción entre la química y la meteorología con distintos grados de complejidad. A escala global, existen Modelos de Química-Clima (CCMs, Chemistry-Climate Models) que incluyen parametrizaciones simplificadas de los principales procesos físicos y químicos que ocurren en la atmósfera, biosfera y océanos. Uno de los CCMs ampliamente utilizado es el modelo global CAM-Chem (Community Atmospheric Model with Chemistry), el cual ha sido desarrollado cooperativamente por la comunidad científica internacional (Lamarque et al., 2012). Es importante recalcar que las distribuciones químicas y campos meteorológicos (ej. concentración de ozono, emisiones de gases invernaderos, perfiles de temperatura y humedad, nubosidad, etc.) generados con CAM-Chem pueden ser utilizadas como condiciones iniciales y de contorno (background) en los modelos regionales de mayor resolución espacial y temporal (Fernandez et al., 2010a, 2010b).

A escala regional, existen Modelos de Transporte-Químico (CTMs, Chemical-Transport Models) que pueden acoplarse a diferentes modelos CCMs de los cuales toman las condiciones iniciales y de contorno (Grell et al., 2005). Uno de los modelos regionales más utilizados es el modelo WRF-Chem (Weather Research and Forecasting model with Chemistry), el cual está basado en el modelo meteorológico WRF (Michalakes et al., 2004). WRF-Chem permite realizar estudios en un amplio abanico de dominios espaciales, que abarcan desde el transporte reactivo de contaminantes a escala continental debido a las condiciones sinópticas existentes, hasta la descripción de la evolución horaria de la pluma de contaminantes de una ciudad y su dependencia con los vientos locales (Peckham et al., 2010). El Modelo WRF-Chem permite realizar un tratamiento más acabado de los procesos físicos y químicos que ocurren en la atmósfera, obteniendo una mejor variabilidad espacial y temporal de la evolución en la concentración de diferentes especies químicas. Sin embargo, para llevar a cabo este tipo de simulaciones, es preciso obtener una configuración específica para cada área de estudio. Vale la pena destacar que las bases de datos globales poseen en general una incorrecta representación en Latinoamérica, y que los inventarios locales deben ser adaptados por el usuario.

2. REDIMENSIONAMIENTO ESPACIAL

La configuración por defecto del modelo WRF-Chem utiliza inventarios globales de emisión equivalentes a los incluidos en CAM-Chem. Entre estos, el inventario de emisión de gases contaminantes y de efecto invernadero de la base EDGAR (Emission Database for Global Atmospheric Research) incluye datos para Argentina y Sudamérica con una resolución aproximada de $100 \times 100 \text{ km}^2$ ($1^\circ \times 1^\circ$) (Olivier and Berdowski, 2001). Si bien esta base de datos posee cobertura global, exhibe una escasa resolución espacial y temporal, por lo que su utilización en el modelado de episodios de contaminación puntuales se ve limitada. Además, recientemente se ha determinado que la representación espacial incluida en dicho inventario global difiere enormemente respecto a las obtenidas utilizando herramientas GIS (Sistema de Información Geográfica) de los diferentes mapas cartográficos desarrollados para la región (Fernández et al., 2014a).

Se presentan resultados para la adaptación de tres inventarios de emisión diferentes en tres dominios regionales anidados de América del Sur (con resoluciones espaciales de 36×36 ,

12x12 y 4x4 km², respectivamente): El primero muestra el redimensionamiento de las emisiones naturales de CHBr₃ (bromoformo) del inventario global de halógenos (VSL) de CAM-Chem, originalmente con una resolución espacial de 100x250 km² y una estacionalidad mensual. El segundo muestra las emisiones globales de CO (monóxido de carbono) obtenidas a partir de la base de datos global EDGAR con resolución espacial de 10x10 km² y variabilidad anual. El tercero es un inventario regional de alta resolución de emisiones vehiculares desarrollado para Argentina, con dependencia horaria y una resolución espacial de 2,5x2,5 km².

Al utilizar una proyección Lambert-Conformal, los puntos de grilla dejan de estar equiespaciados, por lo que la forma y tamaño del área de la celda delimitada por los mismos, en las que se va a calcular la emisión va a depender de sus valores de latitud y longitud. El área de cada sector de grilla se calculó mediante la siguiente ecuación.

$$A_{(i,j)} = r_{Tierra}^2 \cdot \sin(\theta) \cdot \Delta lat \cdot \Delta long \quad (1)$$

donde r_{Tierra} es el radio de la Tierra (considerado constante) y θ es el valor promedio de las latitudes superior e inferior del área considerada. Al tener un dominio que considera tanto zonas ecuatoriales como polares, la diferencia entre los valores de área en una zona y otra puede llegar a ser de hasta un 40 %.

2.1. Emisiones Naturales de Halógenos (VSL)

El bromoformo (CHBr₃) es un halógeno gaseoso emitido en zonas oceánicas costeras por el fitoplancton y por algas marinas. Diversos análisis realizados muestran que, para una determinada latitud, la cantidad de gas emitido a la atmósfera en la costa es hasta 2.5 veces mayor a la emisión encontrada lejos de la zona continental. Al mejorar la resolución espacial en esta zona, se puede ver que las emisiones ya no toman valores nulos cuando se analiza la zona continental, sino que decae linealmente (Figura 1).

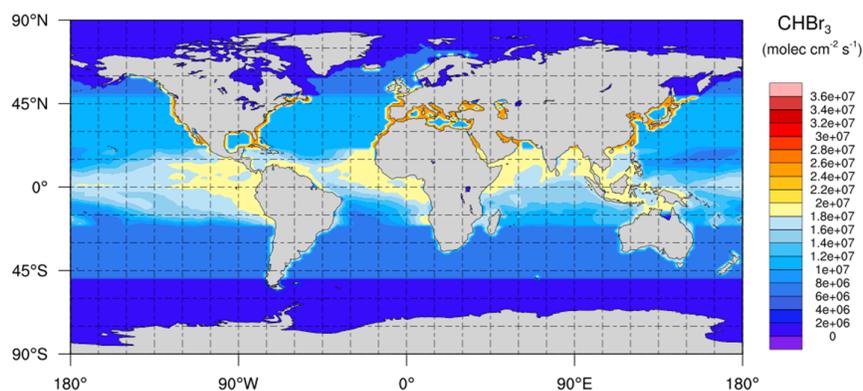


Figura 1. Emisión global de CHBr₃ según el Modelo CAM-Chem.

El redimensionamiento se realizó acoplado la rutina `anthro_emiss` de forma tal de reestructurar las emisiones del inventario global con grillas equiespaciadas ($1.9^\circ \times 2.5^\circ$) a un dominio regional con proyección Lambert-Conformal ($30 \times 30 \text{ km}^2$).

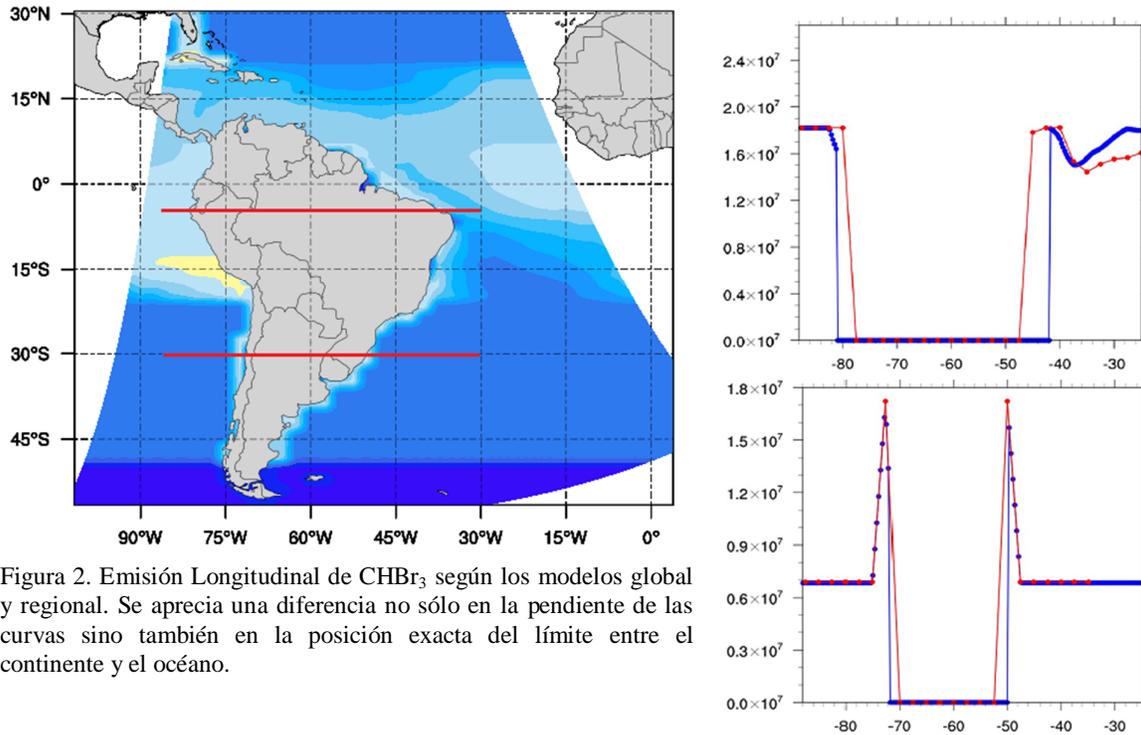


Figura 2. Emisión Longitudinal de CHBr_3 según los modelos global y regional. Se aprecia una diferencia no sólo en la pendiente de las curvas sino también en la posición exacta del límite entre el continente y el océano.

2.2. Emisiones Antropogénicas de CO_2

En este caso se partió del inventario de emisión de gases contaminantes y de efecto invernadero de la base de datos EDGAR v4.2 (Emissions Database for Global Atmospheric Research; EC-JRC/PBL, 2011), y se analizaron los campos de emisión vehicular (sector 1A3b) de CO_2 en Argentina. Dicha base de datos posee una resolución espacial de $1^\circ \times 1^\circ$. Es importante mencionar que, para obtener las emisiones de un país en particular, la herramienta agrega una nueva variable denominada `POLIT_MAP`, desarrollada para asignar un índice a cada país por medio de una división política. Esto permite seleccionar el país que se desee por medio de su índice y sólo se consideran las emisiones producidas en ese territorio. Este desarrollo se incluyó en la herramienta WPS (WRF Preprocessing System) del sistema de modelado WRF-Chem. Al utilizar la herramienta de redimensionamiento, se logró obtener mapas de distribución espacial para los tres dominios anidados anteriormente mencionados, es decir, con resoluciones espaciales de 36×36 , 12×12 y $4 \times 4 \text{ km}^2$, respectivamente.

Posteriormente se realizó un proceso similar, pero ahora tomando como fuente la base de emisiones generada por el grupo GEAA con emisiones de CO_2 vehicular para el territorio

argentino. Si bien este inventario tiene una resolución espacial de $2,5 \times 2,5 \text{ km}^2$, se consiguieron mapas equivalentes a los anteriores. Cabe destacar que la herramienta fue desarrollada para interpolar o promediar los valores, según el inventario base posea una menor o mayor resolución que la requerida, respectivamente.

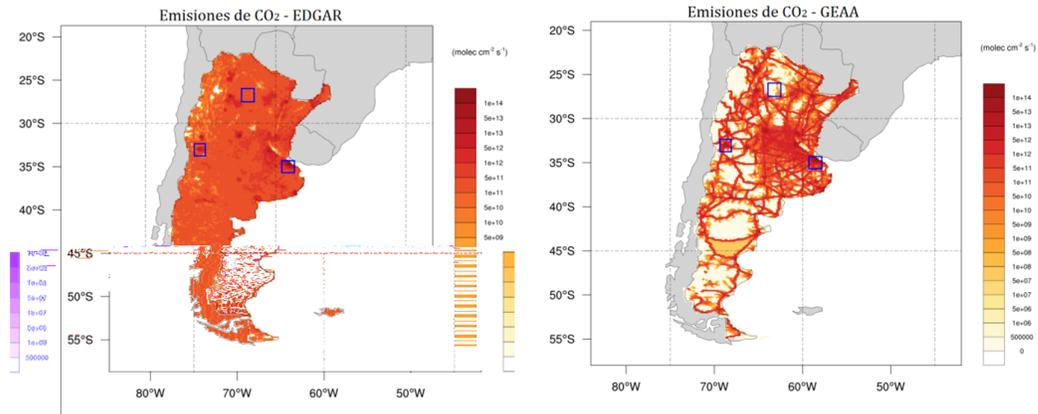


Figura 3. Emisiones de CO₂ para las bases de datos de EDGAR (izquierda) y GEAA (derecha). Los recuadros azules resaltan los diferentes sectores sobre los que se realizó la estadística comparativa.

Una vez obtenidos los campos de emisión para toda la Argentina partiendo de la base de EDGAR y del Inventario Regional (GEAA), se procedió a comparar la estadística obtenida en cada uno. Para ello se seleccionaron tres sectores, uno centrado en una zona rural (Norte Argentino, Figura 4), otro en una ciudad de tamaño intermedio (Mendoza, Figura 5), y el tercero en una Megaciudad (Buenos Aires, Figura 6). Nótese que los valores máximo (MAX), mínimo (MIN) y la desviación estándar (ST DEV) están medidos en $\text{molec.cm}^2.s^{-1}$, mientras que los valores promedio (AVG) y la suma total (TOTAL) tienen unidades de kg.día^{-1} . La comparación gráfica entre los valores máximos y totales de emisión de CO₂ para los inventarios GEAA y EDGAR en tres áreas con diferente densidad de población, analizadas con tres resoluciones espaciales cada una se muestra en la Figura 7. Puede apreciarse tanto gráfica como analíticamente una clara sobrestimación de los valores de emisión para las zonas rurales en la base de datos de EDGAR, mientras que para ciudades intermedias y megaciudades los valores máximos y totales son similares. A su vez, la mejora en la resolución espacial permite apreciar las diferencias entre valores máximos y mínimos con mayor precisión.

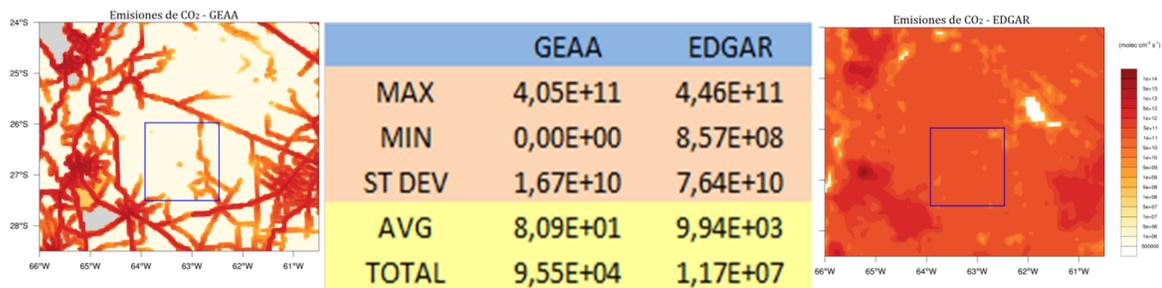


Figura 4. Emisiones de CO₂ para el sector Norte Argentino y comparación de sus principales valores estadísticos

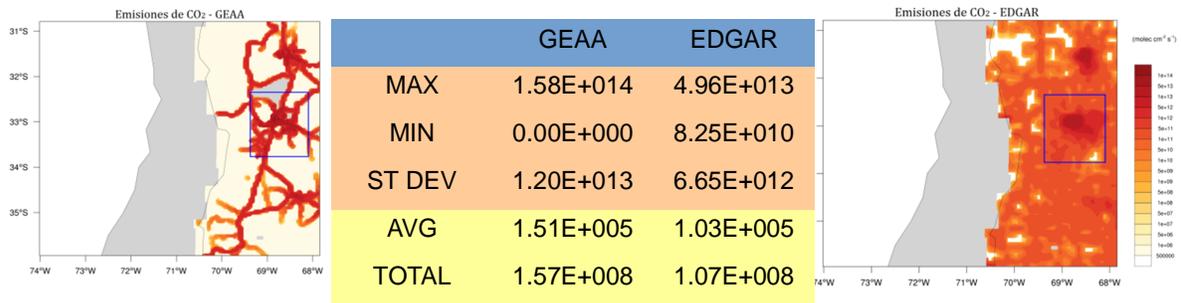


Figura 5. Emisiones de CO₂ para el sector Mendoza y comparación de sus principales valores estadísticos.

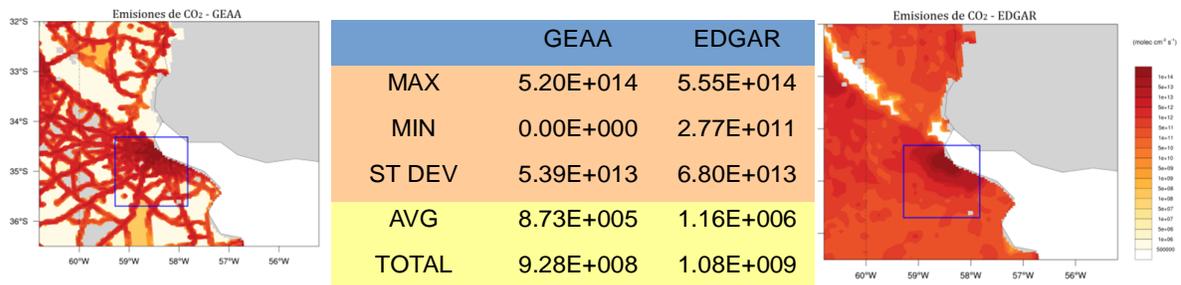


Figura 6. Emisiones de CO₂ para el sector Buenos Aires y comparación de sus principales valores estadísticos.

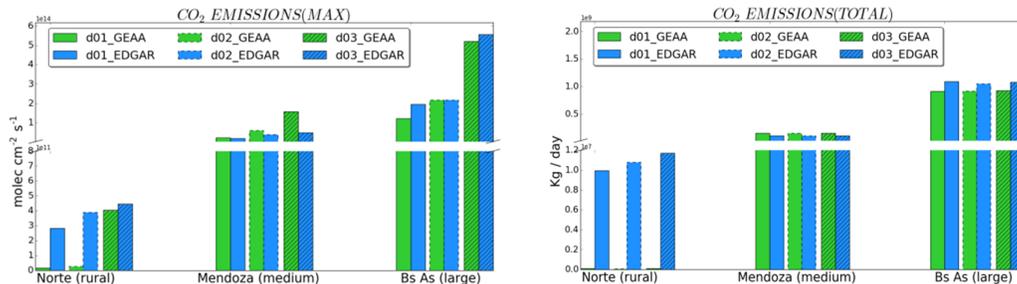


Figura 7. Comparación estadística de los valores máximos (izquierda) y totales (derecha) de emisión de CO₂ para las tres zonas geográficas presentadas, de acuerdo a diferentes niveles de resolución.

3. ANÁLISIS DE LOS PERFILES TEMPORALES IMPUESTOS

3.1. Perfiles de emisiones naturales

Se analizaron diferentes tipos de perfiles temporales diurnos para las emisiones naturales oceánicas, basadas en el comportamiento emisor temporal del alfafineno y del isopreno a la atmósfera, y diferentes variantes respecto de esos mismos perfiles. Fue necesario agregar un

factor que tuviese en cuenta el Ángulo Zenital (SZA), lo que genera una dependencia de la latitud a la que se encuentre el punto del mapa y la época del año en que se esté analizando. Cabe destacar que en todos los casos se tuvo como premisa que el valor de la emisión total anual debía mantenerse igual al correspondiente a la base de datos global. A continuación se muestran los resultados obtenidos para cada uno de los perfiles temporales utilizados.

3.1.1. Alfapineno

El perfil temporal del alfapineno es una función rectangular (tipo top-hat). Este perfil horario representa aquellos ejemplos de emisiones que toman valor cero cuando no hay radiación solar incidente (cuando es de noche) y tiene un valor máximo constante en todas las horas en las que tenga algún valor de luz natural. Se representan mediante:

$$\begin{aligned} y_{(i,j)} &= \left(\frac{1}{0.7 + 0.3 \cdot d_f} \right) \cdot y_{(i,j)} && (\text{día}) \\ y_{(i,j)} &= 0.7 \cdot y_{(i,j)} && (\text{noche}) \end{aligned} \quad (2)$$

donde d_f es la fracción diaria con luz solar.

3.1.2. Alfapineno (cos SZA)

En este caso el perfil *Alfapineno* se modificó de manera que los valores mínimos de emisión no fuesen nulos, es decir que se considera que una parte de la emisión diaria se genera durante la noche, mientras que en el día se alcanza el valor máximo de emisión constante. Además, se agrega un factor que tiene en cuenta el coseno del Ángulo Zenital (SZA), lo que genera una dependencia de la latitud a la que se encuentre el punto del mapa y la época del año en que se esté analizando. Se representan mediante:

$$\begin{aligned} y_{(i,j)} &= \left(\frac{\cos(SZA)}{d_f} \right) \cdot y_{(i,j)} && (\text{día}) \\ y_{(i,j)} &= 0 && (\text{noche}) \end{aligned} \quad (3)$$

3.1.3. Isopreno

El perfil temporal del isopreno es una función periódica positiva (tipo \sin^2). Este perfil horario muestra valores nulos de emisión cuando no hay radiación solar incidente, mientras que en las horas diurnas presenta un perfil seno cuadrado para un periodo completo, cuyo máximo aparece en el horario de máxima radiación incidente. Se representan mediante:

$$\begin{aligned} y_{(i,j)} &= \left(\left(\frac{2}{d_f} \right) \sin^2 \left(\frac{1}{2d_f} \right) \right) \cdot y_{(i,j)} && (\text{día}) \\ y_{(i,j)} &= 0 && (\text{noche}) \end{aligned} \quad (4)$$

3.1.4. *Isopreno (Noche)*

Se presenta una modificación del perfil *Isopreno*, donde nuevamente se considera un valor de emisión mínimo constante no nulo en las horas en las que no hay radiación solar incidente. Esto provoca que los valores máximos de emisión sean menores a los encontrados en el perfil *Isopreno*, ya que la emisión total diaria debe ser idéntica. Se representan mediante:

$$y_{(i,j)} = \left(1 + \left(\frac{0.7}{0.7 + 0.3 \cdot d_f} \right) \left(\left(\frac{2}{d_f} \right) \cdot \sin^2 \left(\frac{\pi}{0.7 + 0.3 \cdot d_f} \right) - 1 \right) \right) \cdot \cos(SZA) \cdot y_{(i,j)} \quad (\text{día})$$

$$y_{(i,j)} = \left(\left(\frac{0.7}{0.7 + 0.3 \cdot d_f} \right) \cdot \cos(SZA) \right) \cdot y_{(i,j)} \quad (\text{noche}) \quad (5)$$

3.1.5. *Isopreno (cos SZA)*

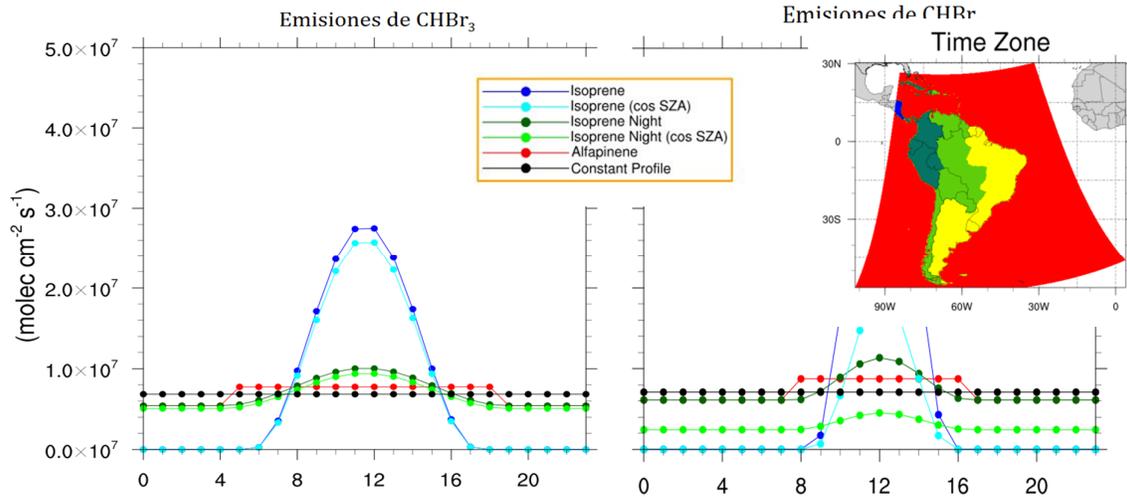
Este último caso es una modificación del perfil *Isopreno*, donde nuevamente se considera el factor que tiene en cuenta el coseno del Ángulo Zenital (SZA). Puesto que ahora la emisión total diaria depende de la época del año que se analice, el valor de emisión total anual es el que debe coincidir con el valor del inventario global. Se representan mediante:

$$y_{(i,j)} = \left(\left(\frac{2}{d_f} \right) \sin^2 \left(\frac{1}{2d_f} \right) \cdot \cos(SZA) \right) \cdot y_{(i,j)} \quad (\text{día})$$

$$y_{(i,j)} = 0 \quad (\text{noche}) \quad (6)$$

Puede observarse la comparación gráfica para cada uno de los perfiles anteriormente mencionados, tanto en verano como en invierno en la Figura 8.

Figura 8. Perfiles temporales de emisión para especies VSL en Verano (izquierda) e Invierno (derecha).



3.2. Perfiles de emisiones antropogénicas

En el caso de las emisiones antropogénicas, no fue necesario considerar el SZA, ya que las emisiones dependen de la variación horaria de la actividad humana. Es por ello que se tuvo en cuenta la zona horaria en la que se encontraba cada punto del mapa. Por esta razón se agregó al WPS otra variable que no es considerada en WRF-Chem por defecto, denominada TIME_ZONE, y define en cada punto de grilla continental la zona horaria correspondiente.

De esta manera se puede conseguir que el perfil temporal sea el mismo para cada punto perteneciente a una determinada zona horaria, de manera que la emisión, siempre ponderada con su valor total correspondiente, responda no sólo al perfil temporal impuesto sino también al propio huso horario (Figura 9 - izquierda).

Cuando analizamos las emisiones para Argentina, todo el territorio tiene el mismo horario, más allá de su extensión, por lo que el perfil temporal asociado (en este caso a las emisiones de CO₂ vehiculares) es el mismo para cada punto de grilla. Se presentan dos perfiles horarios vehiculares, uno para zonas urbanas y otro para zonas rurales (Figura 9 - derecha).

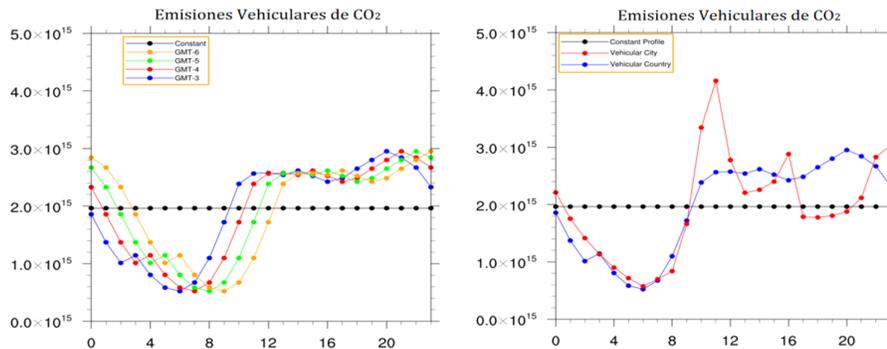


Figura 9. La herramienta de pre-procesamiento permite el cambio de huso horario (izquierda) y la inclusión de diversos perfiles temporales asociados a diferentes procesos (derecha).

4. CONCLUSIONES

- La herramienta de redimensionamiento espacial `antro_emiss` modificada puede generar emisiones regionales tanto a partir de inventarios globales (con resolución inferior que el dominio WRF-Chem requerido) como de inventarios de emisiones locales (con una mayor resolución que WRF-Chem). La actualización del WPS incluye la implementación de mapas políticos y de zonas horarias continentales.
- La inclusión de perfiles temporales horarios permite obtener una representación más realista del proceso natural que genera esas emisiones, así como del comportamiento temporal de las actividades humanas para las fuentes antropogénicas.
- Para fuentes naturales dependientes de la radiación solar (como CHBr_3), un perfil de emisión ponderado por el coseno del Ángulo Zenital (SZA) permite una mejor representación de la eficiencia de los procesos biogeoquímicos de acuerdo a una variación estacional (por ejemplo, invierno-verano).

REFERENCIAS

- [1] Fernández, R. P., Allende, D. G., Castro, F. H., Cremades, P. G. and Puliafito, S. E.: Modelado regional de la calidad de aire utilizando el modelo `wrf/chem`: implementación de datos globales y locales para Mendoza, Av. en Energías Renov. y Medio Ambient., 14, 43–50, 2010a.
- [2] Jacobson, M. Z.: *Fundamentals of Atmospheric Modeling*, Cambridge University Press., 2005.
- [3] Ordóñez, C., Lamarque, J.-F., Tilmes, S., Kinnison, D. E., Atlas, E. L., Blake, D. R., ... Saiz-Lopez, A. (2012). Bromine and iodine chemistry in a global chemistry-climate model: description and evaluation of very short-lived oceanic sources. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12(3), 1423–1447. <http://doi.org/10.5194/acp-12-1423-2012>.
- [4] Peckham, S., Grell, G., McKeen, S., Fast, J., Gustafson, W., Ghan, S., Zaveri, R., Easter, R., Barnard, J., Chapman, E., Wiedeinmyer, C., Schmitz, R., Salzman, M. and Freitas, S.: *WRF/Chem Version 3.2 Users Guide.*, 2010.

- [5] 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. <http://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.11.040>.