

Obtención de mapas de calidad de aire, a través de la implementación y primera aplicación del modelo de transporte químico CHIMERE sobre Argentina

por *María Fernanda García Ferreyra*

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía y Física
y el Instituto de Altos Estudios Espaciales Mario Gulich
como parte de los requerimientos para la obtención del grado de

MAGÍSTER EN APLICACIONES ESPACIALES DE ALERTA
Y RESPUESTA TEMPRANA A EMERGENCIAS

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Marzo, 2014

©IG - CONAE/UNC 2014

©FaMAF - UNC 2014

Director: Gabriele Curci (CETEMPS, Univ. dell'Aquila)

Co Director: Mario Lanfri (CONAE)

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Resumen

Facultad de Astronomía, Matemática y Física

Maestría en Aplicaciones Espaciales de Respuesta y Alerta Temprana a Emergencias

Obtención de mapas de calidad de aire, a través de la implementación y primera aplicación del modelo de transporte químico CHIMERE sobre Argentina

por María Fernanda GARCÍA FERREYRA

Actualmente hay evidencia suficiente acerca de que los contaminantes atmosféricos antropogénicos tienen marcados efectos sobre la salud humana, ecosistemas, cultivos y materiales. En Latinoamérica y Argentina se realizan desde hace algunos años actividades coordinadas para la evaluación y control de estas emisiones, principalmente en ciudades con reconocida problemática en la calidad del aire.

La predicción de concentraciones de contaminantes, para distintas regiones, se basa en información precisa sobre emisiones, topografía, meteorología, química y procesos de deposición. El uso de modelos y monitoreo continuo es clave para el control de la calidad del aire. A través de la implementación y aplicación, por primera vez en Argentina, del modelo de transporte químico CHIMERE (WRF-CHIMERE-EDGAR) se obtiene la distribución espacial de ozono troposférico y sus precursores. Para esto se creó la interfaz requerida entre CHIMERE y el inventario de emisiones EDGAR, y se evaluó el desempeño del sistema de modelado sobre tres ciudades argentinas, utilizando mediciones de campo. Aún es necesario ajustar parámetros de los modelos para su mejor aplicación y operativización sobre Argentina.

Las mediciones y resultados son de gran interés porque significan la posibilidad no sólo de comenzar a indagar sobre la calidad del aire que respiramos en nuestro país, sino también de desarrollar sistemas de alerta temprana para la población en caso de eventos desastrosos.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Abstract

Facultad de Astronomía, Matemática y Física

Maestría en Aplicaciones Espaciales de Respuesta y Alerta Temprana a Emergencias

Obtaining air quality maps through the implementation and first application of the chemical transport model CHIMERE over Argentina

by María Fernanda GARCÍA FERREYRA

At present there is evidence enough to assure that anthropogenic atmospheric emissions have strong effects on human health, ecosystems, crops and materials. In Latin America and Argentina coordinated efforts for the assessment and control of these emissions have been performed in the last few years, mainly in urban areas with acknowledged problems in air quality.

The prediction of time-based concentrations of pollutants in various regions is based on thorough information about emissions, topography, meteorology, chemistry and deposition processes. Chemical transport models, along with continuous monitoring, are a key tool for the control of air quality. Through the implementation and application of CHIMERE chemical transport model (WRF-CHIMERE-EDGAR), for the first time in Argentina, spatial distribution of tropospheric ozone and its precursors were obtained. To achieve this, the interface required between CHIMERE and EDGAR emissions inventory was created and the performance of the modelling system on three argentine cities was assessed, comparing it to field measurements. It is still necessary to adjust some of the parameters of the models for an improved application and operability over Argentina.

The measurements and results are of great interest because it means the possibility not only of starting to find out about the quality of the air we breathe in our country, but also of developing early warning systems for the population in case of disasters.



Agradecimientos

- Al Tribunal evaluador: Sandra Torrusio (CONAE), Olga Nasello (FaMAF, UNC), Rodolfo Pereyra (FaMAF, UNC) y Cecilia Provensal (UNRC).
- Al Instituto de Altos Estudios Espaciales Mario Gulich, a la Universidad Nacional de Córdoba y a la Comisión Nacional de Actividades Espaciales. A la Educación Pública!
- A la Agenzia Spaciale Italiana y CETEMPS-UnivAQ, Italia.
- A las instituciones que brindaron sus datos para la realización de este trabajo:
 - Sec. De Ambiente de Córdoba
 - Agenzia de Protección Ambiental de CABA
 - Comité Técnico Ejecutivo de Bahía Blanca a través de Sergio Daniel Vega
 - Servicio Meteorológico Nacional
 - A David Allende, Grupo de Estudios de la Atmósfera y el Ambiente (GEAA), UTN Regional Mendoza
 - A Jorge Reyna Almandos, Centro de Investigaciones Ópticas de La Plata
 - A Daniel Brizuela, Director de Gestión Ambiental de la Municipalidad de Río Tercero
 - A Karina Quaini, de la Secretaría de Ambiente de la Nación
 - A Sebastián Rusillo, del Grupo de Estudios Sobre Energía (GESE), UTN Regional Santa Fe
- A los investigadores y compañeros que aportaron sus datos, su experiencia y voluntad de cooperación en distintas instancias de la tesis: Sylvain Mailler, David Allende, Hebe Carreras, Andrés Lighezzolo, Anabella Ferral, Gabriela Abril, Martín Labanda, Sebastián Heredia y muchísimos más!

- A Gabriele Curci por sus invaluable aportes y apoyo durante mi estadía en L'Aquila y tesis.
- A Mario Lanfri y Marcelo Scavuzzo por su guía constante durante la maestría y tesis.
- A todos mis compañeros del Gulich por compartir todas las horas, anécdotas y risotadas!
- A mis amigos "MAREARTE-2011", son los más geniales!
- A Cali y todos por sus cielos.
- A mi familia siempre linda e incondicional :) <3

Contenidos

Título	i
Resumen	i
<i>Abstract</i>	ii
Agradecimientos	iii
Contenidos	v
Lista de Figuras	viii
Lista de Tablas	ix
Acrónimos	x
Símbolos	xiii
1 Marco teórico	6
1.1 El sistema atmosférico	6
1.2 Fuentes de contaminación atmosférica	7
1.2.1 Tipos de Fuentes	10
1.3 Introducción a la Química Atmosférica	10
1.3.1 Reacciones en la Tropósfera	12
1.4 Efectos de la calidad del aire en la salud	16
1.5 Evaluación de la calidad del aire	17
1.5.1 Modelos atmosféricos	18
1.5.2 Modelos de transporte químico	19
1.5.3 Modelos meteorológicos	20
1.5.4 Inventarios de emisiones	20
2 Calidad del aire en Argentina	22
2.1 Área de estudio	22
2.2 Calidad del aire en Argentina	23
2.3 Legislación de contaminantes	28
2.4 Recolección de datos meteorológicos y de calidad de aire para la evaluación del sistema de modelado	29

2.4.1	Características de los sitios de monitoreo	38
2.4.1.1	Buenos Aires	38
2.4.1.2	Córdoba	39
2.4.1.3	Bahía Blanca	39
2.4.1.4	Características generales de los sitios de monitoreo, para la evaluación del Sistema de Modelado	40
3	Sistema de modelado	41
3.1	Sistema de modelado de la calidad del aire	41
3.1.1	Dominio espacial	42
3.1.2	Período de tiempo de simulación	43
3.2	Implementación y aplicación de un modelo meteorológico: WRF	43
3.2.1	Descripción de WRF	43
3.2.1.1	<i>WRF Preprocessing System</i> (WPS)	45
3.2.1.2	<i>Advanced Research WRF</i> (ARW)	46
3.2.2	Herramientas de visualización gráfica y de posprocesamiento	47
3.2.3	Configuración del modelo	47
3.2.4	Simulaciones sobre el dominio espacial	48
3.3	Implementación y aplicación de un modelo de transporte químico: CHIMERE	48
3.3.1	Descripción	48
3.3.1.1	Datos de entrada	51
3.3.1.2	Ecuaciones gobernantes	53
3.3.2	Configuración del modelo	54
3.3.3	Simulaciones sobre el dominio espacial	54
3.4	Inventario de Emisiones: EDGAR	58
3.4.1	Descripción	58
3.4.1.1	Especies estimadas:	59
3.4.1.2	Categorías de las emisiones: sectores IPCC	59
3.4.1.3	Incertezas de EDGAR	60
3.4.1.4	Emisiones en el mundo	60
4	Interfaz CHIMERE-EDGAR	62
4.1	Detalles técnicos de la interfaz	62
4.1.1	Descarga de datos de EDGAR v4.2	63
4.1.2	Conversión de concentraciones de las emisiones desde sectores IPCC a SNAP y generación de la grilla de datos	64
4.1.3	Modificación y uso del código de la interfaz de emisiones emiSURF	65
4.2	Total de emisiones en Argentina	68
4.2.1	Comparación de estimaciones EDGAR con las del inventario argen- tino	70
5	Evaluación del sistema de modelado	73
5.1	Descripción de índices estadísticos	73
5.2	Pautas generales de la evaluación	75
5.3	Evaluación del modelo meteorológico WRF	76
5.4	Emisiones EDGAR	83

5.5	Evaluación del modelo de transporte químico	
	CHIMERE	85
5.5.1	Inconmensurabilidad	93
5.6	Modificación en las configuraciones meteorológicas y espaciales	93
5.6.1	Pruebas de sensibilidad para la capa límite atmosférica	93
5.6.2	Anidado sobre Buenos Aires	97
6	Conclusiones y Proyecciones	101
6.1	En conclusión...	101
6.2	Entonces... (Proyecciones)	103
A	Apéndice A: Códigos de conversión de sectores IPCC a SNAP	105
A.1	Conversión de NO _x de sectores IPCC a SNAP	105
A.2	Conversión de NMVOC de sectores IPCC a SNAP	111
A.3	Conversión de NH ₃ de sectores IPCC a SNAP	117
A.4	Conversión de SO ₂ de sectores IPCC a SNAP	123
A.5	Conversión de CO de sectores IPCC a SNAP	128
A.6	Conversión de PM10 de sectores IPCC a SNAP	133
B	Apéndice B: Nuevo Código para emiSURF	140
	Referencias	149

Índice de Figuras

1.1	Sistema de contaminación atmosférica	7
1.2	Interconversión de especies en la tropósfera	11
1.3	Reacciones de compuestos nitrogenados.	14
1.4	Reacciones de COVs	15
2.1	Mosaico de Argentina, obtenido de imágenes del satélite SAC-C.	23
2.2	Mediciones de sitios de monitoreo para el año 2009.	37
2.3	Frecuencia de vehículos en la ciudad de Buenos Aires	38
2.4	Frecuencia y tipo de vehículos en la ciudad de Córdoba	39
3.1	Sistema de modelado	42
3.2	Dominio de modelado	43
3.3	Diagrama de flujo del sistema de modelado WRF	45
3.4	Simulación de temperatura y viento, por WRF	49
3.5	Simulación de la altura de capa límite atmosférica, por WRF	50
3.6	Mapas de salida de CHIMERE para NO ₂	55
3.7	Mapas de salida de CHIMERE para O ₃	56
3.8	Mapas de salida de CHIMERE para PM10	57
3.9	Inventario de emisiones global EDGAR	61
4.1	Conversión de sectores IPCC a SNAP y fusión de datos	65
4.2	Inventario de emisiones EDGAR para Argentina	69
4.3	Contribuciones proporcionales de los sectores SNAP a emisiones en Argentina.	70
5.1	Simulaciones vs. mediciones meteorológicas de Buenos Aires	79
5.2	Simulaciones vs. mediciones meteorológicas de Córdoba	80
5.3	Simulaciones vs. mediciones meteorológicas de Bahía Blanca	81
5.4	Variaciones diarias de datos meteorológicos	82
5.5	Emisiones EDGAR de contaminantes, con distribución temporal	84
5.6	Simulaciones vs. monitoreo de contaminantes en Buenos Aires	86
5.7	Simulaciones vs. monitoreo de contaminantes en Córdoba	87
5.8	Simulaciones vs. monitoreo de contaminantes en Bahía Blanca	88
5.9	Variaciones diarias de datos meteorológicos	89
5.10	Esquema de la capa límite atmosférica	94
5.11	Altura de capa límite para distintas configuraciones	96
5.12	Pruebas de capas límites para WRF	97
5.13	Dominios anidados sobre Buenos Aires	98
5.14	Resultados del dominio anidado	99

Índice de Tablas

1.1	Efectos de la contaminación del aire sobre la salud	17
2.1	Concentraciones límite establecidas por Argentina, EE.UU. y la OMS . . .	29
2.2	Monitoreo de contaminantes en Argentina	31
2.3	Datos de campo utilizados en este trabajo	36
3.1	Opciones físicas de configuración del modelo ARW	48
3.2	Opciones de la química	54
4.1	Conversión de sectores IPCC a SNAP.	64
4.2	Aportes de cada sector productivo a las emisiones calculadas por el In- ventario EDGAR v4.2 [Gg/año]	68
4.3	Comparación de estimaciones de los inventarios argentino y EDGAR v4.2 [Gg/año]	72
5.1	Evaluación estadística de simulaciones meteorológicas	83
5.2	Evaluación estadística de simulaciones de calidad del aire	90
5.3	Esquemas de Capa Límite	95

Acrónimos

3-D	3 Dimensiones
ACUMAR	A utoridad de C uenca M atanza R iachuelo
AEARTE	A plicaciones E spaciales de A lerta y R espuesta T emprana a E mergencias
AFWA	<i>Air Force Weather Agency</i>
AMBA	A rea M etropolitana de B uenos A ires
AOD	<i>Aerosol Optical Depth</i> , profundidad óptica de aerosoles
AOT	<i>Aerosol Optical Thickness</i> , equivalente a AOD
ARW	<i>Advanced Research WRF</i>
ASCII	<i>America Standard Code for Information Interchange</i>
ATS	<i>American Thoracic Society</i>
CAPS	<i>Center for Analysis and Prediction of Storms</i>
CETEMPS	<i>Centro di Eccellenza di Telerilevamento E Modellistica numerica per la Previsione</i>
CFCs	Clorofluorocarbonos
CIOp	Centro de Investigaciones Ópticas
CL	Capa Límite Atmosférica
CONAE	C omisión N acional de A ctividades E spaciales
CORINAIR	<i>Core Inventory Air emissions</i>
CTE	C omité T écnico E jecutivo
ECM	E rror C uadrático M edio
EDGAR	<i>Emission Database for Global Atmospheric Research</i>
EMEP	<i>European Monitoring and Evaluation Programme</i>
EPA	<i>Environmental Protection Agency</i>
ESRL	<i>Earth System Research Laboratory</i>
FAA	<i>Federal Aviation Administration</i>
FaMAF	F acultad de A stronomía, M atemática y F ísica
GCABA	G obierno de la C iudad A utónoma de B uenos A ires

GDAS	<i>Global Data Assimilation System</i>
GEMS	<i>Global Environmental Monitoring System</i>
GNU	GNU No es Unix!
GrADS	<i>Grid Analysis and Display System</i>
GRIB	<i>Gridded Information in Binary Form</i>
HAPs	Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos
HTAP	<i>Hemispheric Transport of Air Pollution</i>
IER	<i>Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung</i>
IG	Instituto de Altos Estudios Espaciales Mario Gulich
INDEC	Instituto Nacional De Estadísticas y Censos
INERIS	<i>Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques</i>
IPCC	<i>Intergovernmental Panel on Climate Change</i>
IPSL	<i>Institut Pierre Simon Laplace</i>
JRC	<i>Joint Research Centre</i>
LISA	<i>Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques</i>
LMD	<i>Laboratoire de Météorologie Dynamique</i>
LSM	<i>Land Surface Model</i>
MAyOP	Ministerio de Ambiente y Obras Públicas
MMM	<i>Mesoscale & Microscale Meteorology Division</i>
msnm	metros sobre el nivel del mar
L	Local
NAAQS	<i>National Ambient Air Quality Standards</i>
NCAR	<i>National Center for Atmospheric Research</i>
NCEP	<i>National Centers for Environmental Prediction</i>
NetCDF	<i>Network Common Data Form</i>
NL	No Local
NOAA	<i>National Oceanic and Atmospheric Administration</i>
NRL	<i>Naval Research Laboratory</i>
OMM	Organización Mundial de Meteorología
OMS	Organización Mundial de la Salud
OPDS	Organismo Provincial para el Desarrollo Sostenible
PBL	<i>Planbureau voor de Leefomgeving</i>
PORG	<i>Photochemical Oxidants Review Group</i>
RMSE	<i>Root Mean Square Error</i>

RRTM	<i>Rapid Radiative Transfer Model</i>
SMN	Servicio Meteorológico Nacional
SMN	Sesgo Medio Normalizado
SNAP	<i>Selected Nomenclature Air Pollution</i>
TKE	<i>Turbulence Kinetic Energy</i>
UNC	Universidad Nacional de Córdoba
UNRC	Universidad Nacional de Río Cuarto
USGS	<i>United States Geological Service</i>
UTN	Universidad Tecnológica Nacional
WPS	<i>WRF Preprocessing System</i>
WOUDC	<i>World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre</i>
WRF	<i>Weather Research and Forecasting Model</i>

Símbolos

Símbolos químicos - especies

BC	Carbono negro (<i>Black carbon</i>)
CFCs	Clorofluorocarbonos
CH ₄	Metano
CO ₂	Dióxido de carbono
CO	Monóxido de carbono
COVs	Compuestos orgánicos volátiles
COVDM	Compuestos orgánicos volátiles distintos a metano, equivalente a NMVOCs
H	Átomo de hidrógeno
HCHO	Formaldehído
HNO ₃	Ácido nítrico
HO ₂	Radical peroxi
H ₂ O	Agua
H ₂ O ₂	Peróxido de hidrógeno, agua oxigenada
HONO	Ácido nitroso
HO ₂ NO ₂	Ácido peroxinítrico
H ₂ SO ₄	Ácido sulfúrico
M	Tercer cuerpo
NMVOC	Compuestos orgánicos volátiles distintos a metano (<i>Non Methane Volatile Organic Compounds</i>)
NH ₃	Amoníaco
NO	Óxido nítrico
NO ₂	Dióxido de nitrógeno

NO ₃	Radical nitrato
NO _x	Óxidos de nitrógeno, NO _x = NO + NO ₂
O(¹ D)	Átomo de oxígeno singlete excitado
O(³ P)	Átomo de oxígeno triplete excitado
O ₂	Oxígeno molecular
O ₃	Ozono
OC	Carbono orgánico (<i>Organic carbon</i>)
OH	Radical oxidrilo
Pb	Plomo
PM _{2.5}	Material particulado de diámetro aerodinámico de 2,5 micrones
PM ₁₀	Material particulado de diámetro aerodinámico de 10 micrones
R	Radical alquilo
RH	Molécula orgánica
RO	Radical alcoxi
RO ₂	Radical alquilperoxi
RONO ₂	Nitrato orgánico
RO ₂ NO ₂	Nitrato alquilperoxido
ROOH	Ácido orgánico
SO ₂	Dióxido de azufre
VOCs	<i>Volatile organic compounds</i> , ver COVs

Introducción

Presentación del problema y motivación

La tropósfera es la región de la atmósfera terrestre en la cual generalmente se emiten compuestos químicos antropofénicos, junto con especies biogénicas. Las especies emitidas (contaminantes primarios) de óxidos de nitrógeno (NO_x), compuestos orgánicos volátiles (COVs) y compuestos sulfurados (SO_2 y otros), sujetas a procesos de dispersión y transporte, son transformadas física y químicamente para producir nuevas especies contaminantes gaseosas y material particulado (contaminantes secundarios). El producto de mayor interés de estas transformaciones es el ozono troposférico (O_3) que afecta áreas urbanas, rurales y a la tropósfera en términos globales; también se producen efectos de deposición ácida (Atkinson 2000, Finlayson-Pitts y Pitts, 2000). Debido a que gran parte de la química se lleva a cabo en presencia de luz, los productos oxidados son comúnmente llamados contaminantes fotoquímicos secundarios.

La emisión y producción de esta variedad de gases contaminantes puede presentar un riesgo para la salud humana directa o indirectamente. Los contaminantes oxidados secundarios pueden ser potencialmente más peligrosos que sus precursores (Jenkin y Clamitshaw, 2000), por ejemplo, la producción de altos niveles de O_3 a nivel de suelo es de particular preocupación ya que se conocen efectos adversos en la salud humana, vegetación y materiales (PORG, 1997).

La contaminación atmosférica es un fenómeno recurrente en muchas ciudades de Latinoamérica, debido a grandes fuentes industriales; de producción, transporte y consumo de energía; erupciones volcánicas y quema de biomasa a gran escala (OMM,

2012).

Del conocimiento detallado de las emisiones, topografía, meteorología, química y procesos de deposición, se desarrollan modelos matemáticos para predecir las concentraciones de los contaminantes primarios y secundarios en función del tiempo, para distintas regiones (Finlayson-Pitts y Pitts, 2000). Estos modelos de transporte químico son una herramienta clave para el conocimiento y control de problemas de calidad de aire. Hay un número creciente de grupos en Latinoamérica desarrollando y aplicando modelos de calidad del aire (OMM, 2012).

En general, hay muy pocas mediciones precisas de calidad de aire en Latinoamérica, tanto para ambientes rurales como urbanos. Muchas veces, la calidad de los datos no es confiable y el acceso a ellos no es tarea fácil (OMM, 2012). Es necesario el monitoreo sistemático de contaminantes atmosféricos para la definición de regulaciones regionales y nacionales de calidad de aire, que debe tener en cuenta factores locales y sociales (OMS, 2005). Las regulaciones ambientales para muchos países latinoamericanos reproducen estándares desarrollados por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos, sin tener en cuenta circunstancias regionales específicas (OMM, 2012). En Argentina, las concentraciones límite de contaminantes atmosféricos establecidas en la Ley Nacional 20.284 (sancionada en el año 1973) son actualizadas a través de leyes y resoluciones provinciales. De esta forma, muchas veces los municipios y provincias comparan los valores de sus mediciones con estándares de la Organización Mundial de la Salud (OMS, 2005) o de la Agencia de Protección Ambiental de EE. UU. (*National Ambient Air Quality Standards -NAAQS-*, *Environmental Protection Agency -EPA*).

El Primer Compendio de Estadísticas Ambientales (2008) realizado por la Secretaría de Ambiente y Desarrollo Sustentable de la Nación Argentina destaca que existen sólo algunas localidades que tienen un registro sistemático de determinados parámetros que permiten dar cuenta de la calidad del aire a la que la población está expuesta.

El trabajo de tesis que se presenta aquí es el primero desarrollado en el Instituto Gulich, en el marco de la Maestría AEARTE, que implica el estudio de la calidad de aire en Argentina, utilizando modelos numéricos.

Su desarrollo significó la primera implementación de un modelo de transporte químico sobre el territorio nacional y la primera utilización del sistema de modelado WRF-CHIMERE-EDGAR para tal fin.

Objetivos

Objetivos Principales

- Obtener mapas con distribución espacial de ozono y especies químicas precursoras de ozono troposférico, sobre el territorio argentino, a través de la implementación y primera aplicación del modelo de transporte químico CHIMERE que utiliza como datos de entrada al inventario global de emisiones antropogénicas EDGAR (*Emissions Database for Global Atmospheric Research EDGAR, JRC - European Comission*) y a los datos de salida del modelo meteorológico de mesoescala WRF (*Weather Research and Forecasting - NCAR*).
- Evaluar estadísticamente los resultados de las simulaciones de CHIMERE con datos de campo, obtenidos por diferentes instituciones de control y de investigación, y productos satelitales, sobre la región de estudio (evaluación operacional).

Objetivo Secundario

- Implementar de forma operativa, un sistema que genere diariamente los productos de simulación del sistema de modelado: pronósticos de distribución de especies químicas (ozono y precursores de ozono troposférico) sobre el territorio argentino y su exhibición en mapas.

Objetivos Específicos

- Instalar los modelos de transporte químico y meteorológico en un servidor del Instituto Gulich.
- Familiarizarse en el uso y parametrización de modelos.

- Desarrollar la interfaz necesaria para el uso del inventario de emisiones antropogénicas EDGAR como dato de entrada al modelo CHIMERE.
- Reunir mediciones de especies químicas en la tropósfera (principalmente ozono y especies precursoras de ozono troposférico) realizadas por distintas instituciones y organizaciones nacionales e internacionales sobre Argentina, necesarias para el proceso de validación del sistema de modelos.
- Obtener productos satelitales de columna total de dióxido de nitrógeno (NO_2), formaldehído (HCHO) y profundidad óptica de aerosoles (*Aerosol Optical Depth*, *AOT*) en la atmósfera.

Descripción de la presentación de tesis

En el Capítulo 1 se presenta el Marco Teórico general de la Tesis. En él se describen características principales del sistema atmosférico y la manera en que la contaminación del aire afecta su calidad, las fuentes de emisiones, las principales reacciones de la química troposférica, el modelado atmosférico y los efectos de salud que genera la exposición aguda y crónica a altos niveles de contaminantes.

En el Capítulo 2 se presenta el área de estudio sobre la que se trabaja: nuestro territorio nacional. Además, se realiza una revisión de los estudios de calidad del aire llevados a cabo por distintos grupos de investigación y agencias ambientales estatales sobre Argentina y la legislación vigente argentina que limita las concentraciones de contaminantes en la atmósfera. Otra gran parte de este Capítulo se refiere a la obtención de datos de campo, tanto del monitoreo continuo de especies como la medición de variables meteorológicas y el contacto con diversas instituciones que participaron colaborativamente con este trabajo. Gracias a los datos recolectados se definió el período temporal de simulación y los sitios que se utilizaron para realizar la evaluación operacional sobre el sistema de modelado.

En el Capítulo 3 se presenta el Sistema de Modelado utilizado por este trabajo, el sistema WRF-CHIMERE-EDGAR. Aquí se describe cada componente del sistema y se definen parámetros físicos, el dominio espacial y el período de tiempo de simulación.

Se muestran además resultados temporales de la simulación sobre el dominio espacial de distintas variables meteorológicas y químicas.

En el Capítulo 4 se presenta el diseño de la interfaz EDGAR-CHIMERE necesaria para la realización del trabajo. El Capítulo se redacta con la forma de una guía para que pueda ser utilizada por cualquier usuario que quiera implementar EDGAR con CHIMERE para la aplicación del modelo sobre alguna región que no tenga un inventario de emisiones propio. También se ponen a disposición los códigos generados para este fin.

En el Capítulo 5 se presenta la evaluación operacional gráfica y estadística del sistema de modelado, particularmente de variables meteorológicas de WRF contrastadas con mediciones de estaciones meteorológicas, de los aportes de emisiones que estima el inventario EDGAR para cada sitio de evaluación y la comparación de los resultados de simulaciones de algunas especies de CHIMERE con mediciones de monitoreo continuo. Además, se muestran resultados preliminares de una prueba de sensibilidad de capa límite atmosférica y de la aplicación de un dominio anidado sobre la ciudad de Buenos Aires de forma tal que pueda mejorar la resolución espacial.

En el Capítulo ?? se presentan las conclusiones y las proyecciones futuras a considerar para dar continuidad a este trabajo.

Capítulo 1

Marco teórico

1.1 El sistema atmosférico

En la Figura 1.1 observamos la descripción del sistema de contaminación del aire, según Finlayson Pitts y Pitts (2000). Fuentes antropogénicas, biogénicas y geogénicas emiten a la atmósfera contaminantes primarios, como los compuestos orgánicos volátiles (COVs), óxido nítrico (NO), dióxido de azufre (SO₂), monóxido de carbono (CO), material particulado de distinto diámetro (PM10 y PM2,5), plomo (Pb), etc. Estos contaminantes sufren el transporte, la dispersión y múltiples transformaciones químicas y físicas. Las transformaciones químicas consisten en la producción de contaminantes secundarios, tales como (NO₂), ácidos (HNO₃, H₂SO₂), ozono troposférico (O₃) y material particulado secundario; las físicas en cambio consisten en la deposición húmeda y seca de contaminantes, nucleación de nubes y otros. Estas transformaciones se producen debido a las condiciones ambientales presentes (viento, humedad, temperatura, radiación solar, etc.) que pueden tener un importante impacto sobre la población, animales, ecosistemas acuáticos, bosques, cultivos agropecuarios y materiales. Los contaminantes también son transportados verticalmente por difusión hasta la estratósfera, donde los procesos de química estratosférica y transporte pueden afectar la capa de ozono a escala local y global.

Para conocer el nivel de impacto de la contaminación atmosférica se utilizan

técnicas de monitoreo continuo y modelado que pronostican posibles situaciones futuras. Los resultados de estos estudios son importantes para asesorar a diseñadores de políticas sobre el riesgo de exposición a la población a fin de que se considere la implementación de acciones que afecten directamente a las fuentes de emisiones primarias.

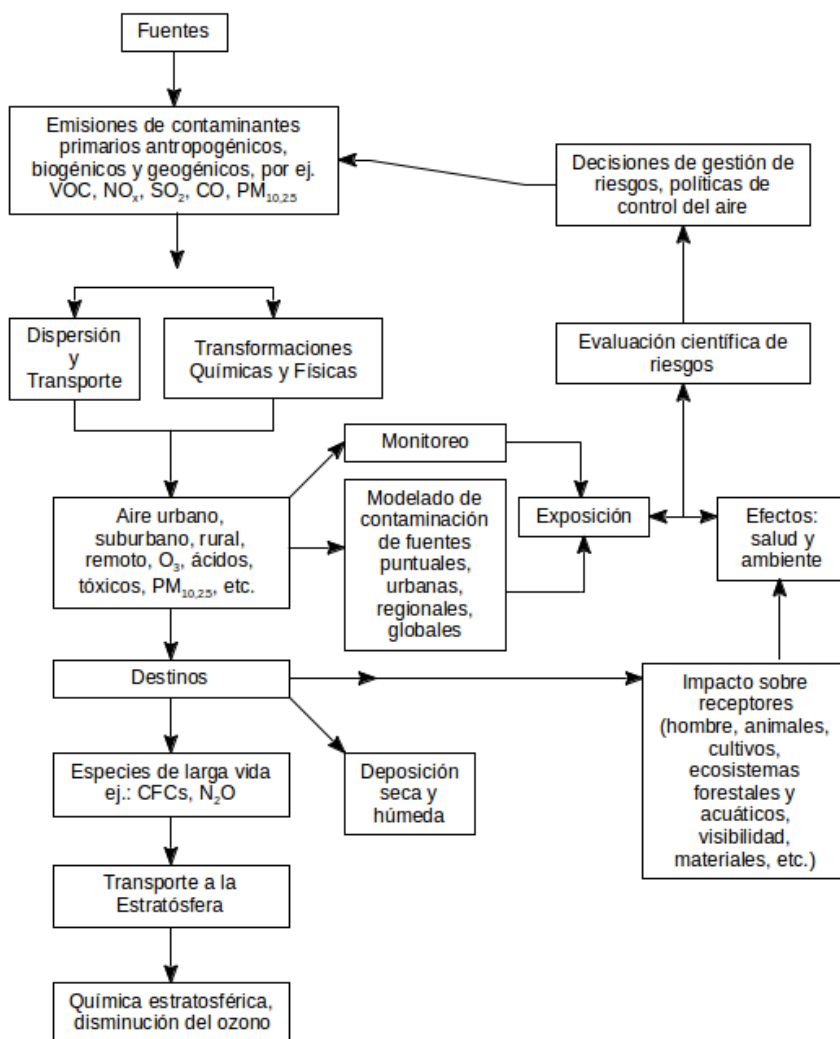


FIGURA 1.1: El sistema de contaminación atmosférica (adaptado de Finlayson Pitts y Pitts, 2000).

1.2 Fuentes de contaminación atmosférica

Como se mencionó anteriormente, los contaminantes primarios son aquellos emitidos por distintas fuentes biogénicas, antropogénicas y geogénicas:

Óxidos de nitrógeno (NO_x)

Las principales fuentes de emisión de óxidos de nitrógeno ($\text{NO}_x = \text{NO} + \text{NO}_2$) son el tránsito vehicular y la generación de energía eléctrica. Estos se producen a partir del nitrógeno contenido en los combustibles fósiles liberado por la reacción de la combinación de nitrógeno y oxígeno atmosféricos que se lleva a cabo cuando se producen combustiones a alta temperatura.

Gran parte de los óxidos de nitrógeno formados de esta manera se emiten como óxido nítrico (NO), mientras que alrededor del 5 – 10 % del total se emite como dióxido de nitrógeno primario (NO_2) (OMS, 2006; PORG, 1997). Así, la mayor proporción de NO_2 atmosférico es un producto secundario de la química atmosférica.

Monóxido de carbono (CO)

Se estima que alrededor de dos tercios del CO emitido corresponde a fuentes antropogénicas: la combustión incompleta de hidrocarburos típica del tránsito vehicular, la combustión industrial, la quema de biomasa y la oxidación de COVs (compuestos orgánicos volátiles) antropogénicos. Otras fuentes biogénicas incluyen la oxidación de COVs emitidos por la vegetación (isopreno, terpenos, entre otros). En términos de tipos de contaminantes, la emisión de CO es de prácticamente la misma magnitud que la producción de CO por oxidación de metano (CH_4) (Seinfeld y Pandis, 2006).

Compuestos orgánicos volátiles (COVs)

El término “compuestos orgánicos volátiles” se utiliza para indicar el conjunto entero de compuestos orgánicos que se encuentran en fase gaseosa en condiciones atmosféricas normales, a excepción de CO y CO_2 . Los COVs son muy importantes en la química atmosférica desde la escala urbana a la global (Seinfeld y Pandis, 2006).

Las fuentes antropogénicas predominantes son la fuga de gas natural de sistemas presurizados y la volatilización de combustibles líquidos. Otras fuentes son los procesos incompletos de la combustión de combustibles fósiles y biomasa, y el uso de solventes orgánicos en pinturas y adhesivos.

La fuente biogénica de COVs también es importante ya que la vegetación libera naturalmente compuestos orgánicos (isoprenos y terpenos) a la atmósfera según

condiciones ambientales, como la temperatura y la luz, o los procesos biofísicos propios de la planta. Debido a esto las emisiones naturales de COVs son generalmente mucho más altas durante el verano. A escala global, las mayores emisiones de COVs biogénicos ocurren en los trópicos, con el isopreno como compuesto principal. Esto es así por la combinación de altas temperaturas y grandes densidades de biomasa. A nivel global, las emisiones biogénicas de hidrocarburos superan en gran cantidad a las antropogénicas (Seinfeld y Pandis, 2006).

Dióxido de azufre (SO₂)

De todas las especies sulfuradas de la atmósfera, el SO₂ es el principal contaminante emitido antropogénicamente (Berresheim et al, 1995). Las fuentes más importantes son la quema de combustibles con contenido de azufre (carbón y petróleo) y las fundiciones en minas de cobre, plomo y zinc, que tienen asociadas contenidos de azufre. Las fracciones molares de SO₂ ambiental, en regiones continentales, pueden ir desde 20 ppt a 1 ppb, mientras que en regiones marinas los niveles bajan a 20 - 50 ppt. En cambio, en espacios urbanos se pueden alcanzar valores de varios cientos de partes por billón (Seinfeld y Pandis, 2006).

Material Particulado

Las partículas en la atmósfera provienen tanto de fuentes naturales, como la erosión del suelo, la suspensión de aerosoles marinos y emisiones volcánicas, y de actividades antropogénicas, como la combustión de hidrocarburos y biomasa, procesos industriales, la construcción y el transporte (OMS, 2006).

Emitidos directamente como partículas (aerosoles primarios) o formados en la atmósfera por procesos de conversión de gas a partícula (aerosoles secundarios), los aerosoles atmosféricos son considerados partículas que poseen un tamaño que va desde unos pocos nanómetros a decenas de micrómetros de diámetro. Aquellas con un diámetro menor a 2.5 μm generalmente se llaman finas y las de mayor diámetro son las partículas gruesas. Las diferencias entre estos dos tipos de partículas se manifiestan en los mecanismos de formación, transformación y eliminación de la atmósfera, su composición, propiedades ópticas y patrones de deposición en el tracto respiratorio. Una

vez en el aire, las partículas pueden cambiar su tamaño y composición por condensación o evaporación de especies gaseosas, por coagulación con otras partículas, por reacción química, o por activación en presencia de sobresaturación de agua para convertirse en niebla y gotas de agua.

Las partículas se eliminan de la atmósfera por los mecanismos de deposición sobre la superficie terrestre (deposición seca) y por su incorporación a las gotas de agua de nubes durante la formación de precipitación (deposición húmeda) (Seinfeld y Pandis, 2006).

1.2.1 Tipos de Fuentes

Los contaminantes primarios, mencionados anteriormente, pueden ser emitidos por fuentes con distintas características en función de la forma de emisión (OMS, 2006):

- **Fuentes puntuales:** se refieren a fuentes que son vistas como puntos individuales en el contexto de un inventario grillado de emisiones. Por ejemplo, una planta de energía eléctrica puede ser considerada como una fuente puntual aunque tenga más de una chimenea.
- **Fuentes lineales:** son aquellas donde la emisión se produce a lo largo de una ruta, autopista o vía de tren. A una altura superior, el recorrido de aviones también implica una fuente lineal.
- **Fuentes zonales:** se refieren a fuentes distribuidas homogéneamente en un espacio y que contribuyen en forma similar a la emisión de gases, por ejemplo las emisiones domésticas de calderas, donde cada caldera hace un pequeño aporte que se vuelve significativo cuando se integran todas las fuentes individuales.

1.3 Introducción a la Química Atmosférica

La emisión de gases contaminantes puede representar un riesgo directo o indirecto para la salud humana a través de los productos de su oxidación. Muchos de estos productos

oxidados secundarios son más peligrosos que los primarios.

La presencia de radiación solar permite que se lleven a cabo numerosas reacciones en la atmósfera, por lo cual los productos oxidados suelen ser llamados contaminantes fotoquímicos secundarios, que incluyen oxidantes fotoquímicos como el O_3 . Jacob (2000) muestra en un simple diagrama (Figura 1.2) la manera en que los contaminantes emitidos y los productos de sus reacciones (descriptas en la subsección siguiente) se interconvierten permanentemente hasta que son eliminados de la atmósfera por procesos físicos.

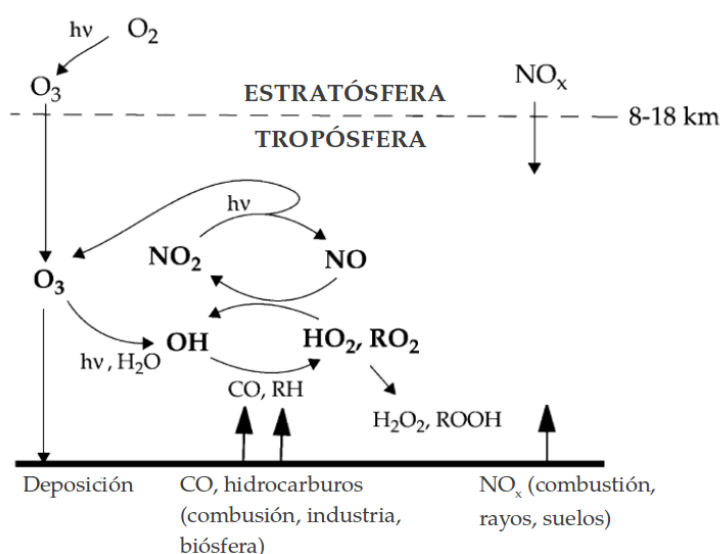


FIGURA 1.2: Reacciones de interconversión de especies en la tropósfera (adaptado de Jacob, 1999).

La producción de altos niveles de O_3 cerca de la superficie es preocupante por sus conocidos efectos adversos sobre la salud humana, la vegetación y los materiales (PORG, 1997).

El impacto que puedan producir tanto los contaminantes primarios como los secundarios se debe considerar no sólo a escala local, sino también a escala regional y global a medida que los contaminantes se transportan y continúan reaccionando.

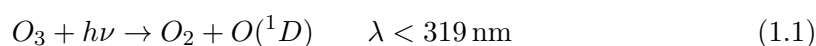
Para evitar los riesgos mencionados, los países establecen estándares de calidad del aire, con concentraciones límites para cada especie; las emisiones deben ser reguladas para que estas concentraciones no sean superadas (Ver sección de Legislación en Argentina, del Capítulo 2).

1.3.1 Reacciones en la Tropósfera

Formación del radical OH

El gran potencial de oxidación de la atmósfera se debe principalmente a la presencia de radicales oxidrilo (OH) ya que las moléculas de oxígeno (O_2) y O_3 no son muy reactivas debido a sus enlaces de alta energía (pueden ser fotolizadas o reaccionar con algunos radicales libres).

La producción de OH se debe a un par de reacciones que dependen de la fotólisis de O_3 y del vapor de agua presente en la atmósfera:



$O(^1D)$ representa un átomo de oxígeno singlete excitado. Esta última reacción es la única que puede romper el enlace H-O del agua (Seinfeld y Pandis, 2006).

El radical OH reacciona con todos los compuestos orgánicos además de los clorofluorocarbonos (CFCs) y aquellos halones que no contienen átomos de hidrógeno (H) (Atkinson, 1989, 1994; De more et al., 1997; Atkinson et al., 1997a). En estas reacciones el OH se regenera por ciclos catalíticos, manteniendo alta su concentración. Por este motivo, el OH es una especie clave en la química troposférica.

Química de los óxidos de nitrógeno

Aproximadamente el 40 % de las emisiones globales resultan de la combustión de combustibles fósiles, que se introducen directamente a la capa límite atmosférica, principalmente en la forma de óxido nítrico (NO). Una pequeña fracción puede ser liberada como dióxido de nitrógeno (NO_2) o producida cerca del punto de emisión por la reacción de NO con O_2 :

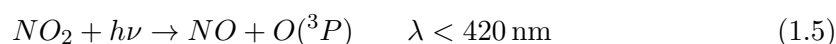


La velocidad de esta reacción depende en gran medida de la concentración de NO. En condiciones troposféricas normales, la reacción anterior es insignificante y el camino dominante por el cual NO se convierte en NO₂ se debe a la reacción con O₃.



Una concentración típica de O₃ en la capa límite es de 30 ppb.

Durante el día, NO₂ vuelve a convertirse en NO como resultado de la fotólisis, lo que también produce la regeneración de O₃:



Las reacciones anteriores constituyen un ciclo sin producción neta. En la ausencia de reacciones de interconversión que compitan, este ciclo lleva a un estado fotoestacionario en el cual las concentraciones de NO y NO₂ están relacionadas con la concentración de O₃ (Leighton, 1961).

Como resultado de esta rápida interconversión, el comportamiento de NO y NO₂ está altamente acoplado, por lo que es común referirse a ellos como NO_x. El tiempo de vida de NO₂ con respecto a la fotólisis en la capa límite depende de la latitud, la estación del año y el momento del día (Jenkin y Clemitshaw, 2000)

El tiempo de vida de NO_x es corto. El principal reservorio, durante el día, de NO_x es el ácido nítrico (HNO₃), producto de su oxidación, que luego es eliminado de la

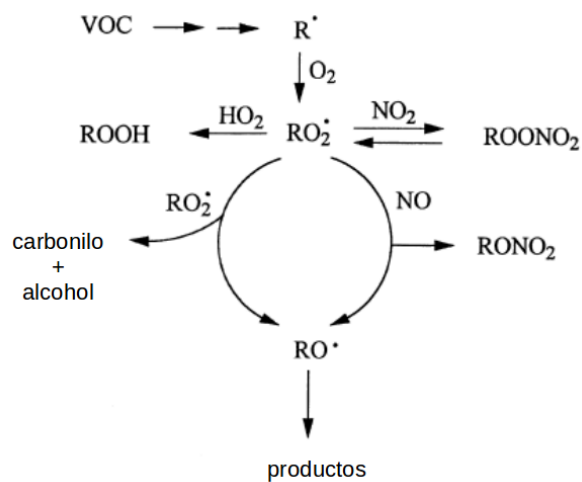


FIGURA 1.4: Reacciones de compuestos orgánicos volátiles, COVs. Adaptado de Atkinson (2000)



Los radicales HO₂ y RO₂ reaccionan con NO, convirtiendo NO a NO₂:



NO₂ luego se fotoliza para formar O₃ (reacciones 1.5 y 1.6). Como es evidente, este proceso resulta en la formación neta de O₃ (Atkinson, 2000).

1.4 Efectos de la calidad del aire en la salud

Existe clara evidencia de que la contaminación del aire está asociada con la mortalidad y morbilidad en la población en general. Sin embargo, los niños, las mujeres y los adultos mayores son los más vulnerables ante estos efectos adversos. Se estima que en los países en desarrollo el 42% del total de afecciones respiratorias pueden atribuirse a la contaminación del aire. Además las investigaciones realizadas en la última década demuestran que se ha incrementado el riesgo de enfermedades cardiovasculares debido al material particulado y exposición al ozono troposférico. Ante este panorama, la OMM (2012) cree que el impacto de la contaminación del aire sobre la salud humana constituye la principal motivación que debe llevar a implementar leyes que regulen la calidad del aire.

Esta situación que se inició a comienzos del s. XX llevó a la adopción de normas de calidad de aire a fin de proteger al público en general de los contaminantes más frecuentes y perjudiciales, especialmente aquellos derivados de la quema de combustibles fósiles. Desde entonces se ha producido una nueva generación de estudios que suministran mayor información sobre la relación entre la contaminación del aire y la salud.

La mayor parte de la evidencia que relaciona los efectos sobre la salud humana con niveles ambientales de contaminación del aire provienen de las áreas de conocimiento de la fisiología clínica, la epidemiología y la toxicología.

La Organización Mundial de la Salud y la *American Thoracic Society* (ATS) han producido una guía para definir lo que constituye un efecto adverso de la contaminación del aire. ATS, por ejemplo, ha identificado una amplia variedad de efectos sobre el sistema respiratorio, en relación a la contaminación del aire, que deben ser considerados “adversos”. Estos varían desde la muerte a causa de enfermedades respiratorias hasta una disminución en la calidad de vida, con casos de cambios irreversibles en las funciones fisiológicas.

Actualmente, la atención que se les presta a los casos más graves proviene de su visibilidad y del impacto económico de efectos tales como mortalidad u hospitalización.

Los casos menos graves son inversamente proporcionales a la frecuencia en que se producen, es decir, el daño es menor pero afecta a muchas más personas. Debe aclararse que la amplia variedad de efectos sobre la salud asociados con la contaminación del aire se debe en parte a distintas susceptibilidades a contaminantes, según factores ambientales o relacionados con el individuo. Los más afectados son los niños, ya que pasan más tiempo al aire libre, incrementando de esta manera su potencial de exposición.

En la última década se ha desarrollado notablemente la comprensión de los mecanismos biológicos a través de los cuales la contaminación del aire ejerce su efecto. Un aspecto que antes no se advertía es que la inflamación de las vías respiratorias lleva a menudo a efectos en el sistema cardiovascular, con un amplio daño resultante, como se refleja en la Tabla 1.1.

TABLA 1.1: Efectos de la contaminación del aire sobre la salud, adaptado de OMS (2006)

Efectos atribuidos a exposición aguda
<ul style="list-style-type: none"> • Mortalidad diaria • Hospitalizaciones por problemas respiratorios y cardiovasculares • Emergencias respiratorias y cardiovasculares • Consultas por problemas respiratorios y cardiovasculares • Uso de medicación para problemas respiratorios y cardiovasculares • Días de actividad restringida • Ausencia en los lugares de trabajo • Ausencia en las escuelas • Síntomas agudos (respiración dificultosa, tos, formación de flema, infecciones respiratorias) • Cambios fisiológicos (por ejemplo, en la función pulmonar)
Efectos atribuidos a exposición crónica
<ul style="list-style-type: none"> • Mortalidad debido a enfermedad cardiovascular y respiratoria • Situación de enfermedad respiratoria crónica (asma, enfermedad pulmonar obstructiva crónica, cambios patológicos crónicos) • Cambios crónicos en las funciones fisiológicas • Cáncer de pulmón • Enfermedad cardiovascular crónica • Restricción en el desarrollo intrauterino (bajo peso al nacer en término, desarrollo intrauterino lento, pequeño para su edad gestacional)

1.5 Evaluación de la calidad del aire

Del conocimiento detallado de las emisiones, topografía, meteorología, química y procesos de deposición, se desarrollan modelos matemáticos para predecir las concentraciones

de los contaminantes primarios y secundarios en función del tiempo, para distintas regiones (Finlayson-Pitts y Pitts, 2000). Los modelos de transporte químico, junto al modelado meteorológico e inventarios de emisiones espaciales, son una herramienta clave para el conocimiento y control de problemas de calidad de aire. En la actualidad hay un número creciente de grupos en Latinoamérica desarrollando y aplicando modelos de calidad de aire (OMM, 2012).

En general, hay muy pocas mediciones precisas de calidad de aire en Latinoamérica, tanto para ambientes rurales como urbanos. Muchas veces, la calidad de los datos y el acceso a ellos no es confiable (OMM, 2012). Es necesario el monitoreo sistemático de contaminantes atmosféricos para la definición de regulaciones regionales y nacionales de calidad de aire, que debe tener en cuenta factores locales y sociales (OMS, 2006). Las regulaciones ambientales para muchos países latinoamericanos reproducen estándares desarrollados por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos, sin considerar circunstancias regionales específicas (OMM 2012). En Argentina, las concentraciones límite de contaminantes atmosféricos establecidas en la Ley Nacional 20.284 (sancionada en el año 1973) son actualizadas a través de leyes y resoluciones provinciales. De esta forma, muchas veces los municipios y provincias comparan los valores de sus mediciones con estándares de la Organización Mundial de la Salud (OMS, 2006) o de la Agencia de Protección Ambiental de EE. UU. (*National Ambient Air Quality Standards* (NAAQS) - *Environmental Protection Agency* (EPA)).

1.5.1 Modelos atmosféricos

Junto a los estudios de laboratorio y las mediciones de campo, el modelado representa uno de los mayores pilares de la investigación en la química atmosférica. Las representaciones matemáticas de la atmósfera en los modelos matemáticos implican el cálculo de parámetros físicos y químicos a partir de condiciones iniciales. El informe GAW 205 (OMM, 2012) explica que la concentración de un componente químico puede ser calculado, después de un corto período de tiempo, desde su valor inicial y la tasa de cambio durante ese tiempo. La tasa de cambio es una función de las reacciones químicas, las emisiones, el transporte por el viento, su remoción por precipitaciones y otros procesos

físico-químicos. Luego, la nueva concentración calculada servirá como valor inicial del cálculo para el próximo tiempo, y así sucesivamente.

En estas simulaciones, los modelos necesitan información que los alimente: mecanismos de reacciones químicas (con constantes de reacción), inventarios de emisiones de contaminantes a la atmósfera distribuidos espacial y temporalmente, radiación solar y condiciones meteorológicas (temperatura, viento, precipitaciones, etc.) con el mismo paso de tiempo que el utilizado por modelos de la calidad del aire. Así, cuando las simulaciones se realizan para una grilla 3-D para un periodo de tiempo definido, es posible calcular la distribución y evolución de los componentes químicos en el espacio y el tiempo.

Así, un modelo atmosférico puede ser utilizado de dos formas:

- como una herramienta de diagnóstico y
- como una herramienta de pronóstico.

Para ganar confianza en el uso de un modelo, es necesario evaluarlo contrastando sus resultados con observaciones de parámetros atmosféricos que también tengan distribuciones espaciales y temporales. Estas evaluaciones deben realizarse en función de la aplicación que tendrá el modelado.

1.5.2 Modelos de transporte químico

Los modelos de transporte químico son modelos numéricos 3-D que simulan los procesos mencionados anteriormente, resolviendo ecuaciones de continuidad para la conservación de la masa de especies químicas en la atmósfera (la ecuación 3.1 se presenta en el Capítulo 3). Jacob (1999) explica que son comúnmente usados para:

- interpretar observaciones atmosféricas en términos de procesos subyacentes;
- proveer relaciones fuente-receptor para entender cómo las concentraciones en una localización dada son afectadas por emisiones “viento arriba”;

- permitir la construcción de balances globales y regionales de especies atmosféricas para proyecciones futuras de posibles escenarios;
- definir conocimiento previo para la extracción de datos de observaciones satelitales de composición atmosférica;
- limitar formalmente flujos superficiales usando mediciones de concentración atmosférica (modelado inverso) o integrar observaciones para la descripción óptima de composición atmosférica (asimilación de datos químicos).

1.5.3 Modelos meteorológicos

Como fue mencionado anteriormente, los modelos meteorológicos otorgan a los modelos de transporte químico las variables necesarias para simular procesos de transporte y remoción de especies en la atmósfera. Estos parámetros en general son: temperatura, dirección y velocidad del viento, precipitaciones, punto de rocío, presión, altura de la capa límite atmosférica, entre otros.

Estos modelos también necesitan condiciones iniciales de entrada. En general, estas condiciones son tomadas de productos de asimilación de datos de estaciones meteorológicas y productos satelitales de monitoreo constante de la atmósfera.

La conveniencia en el uso de modelos meteorológicos, sobre los datos monitoreados, radica en que estos pueden generar productos con un dominio y resolución espacial y temporal similar al utilizado por los modelos de transporte químico.

1.5.4 Inventarios de emisiones

Los inventarios de emisiones son herramientas importantes de estimación de la emisión de especies primarias desde diferentes fuentes, en un área geográfica que puede consistir en una ciudad, un país o un continente. Son significativos porque ilustran la importancia relativa de distintas categorías de fuentes y la tendencia temporal de emisiones de contaminantes, y porque permiten comparar los perfiles de emisión de distintas áreas geográficas.

La estimación se basa en una técnica que utiliza factores de emisión según el tipo de fuente y actividad que la emite:

$$\text{Emisión anual} = \text{Medición de la actividad} \times \text{Factor de emisión} \quad (1.12)$$

En el Capítulo 3 se muestra la ecuación 3.4 de estimación de la base de datos EDGAR que se utiliza en este trabajo.

Capítulo 2

Calidad del aire en Argentina

2.1 Área de estudio

El área de interés para este trabajo es el territorio nacional en el continente americano e islas de la Provincia de Tierra del Fuego.

Nuestro país se extiende desde la latitud -21.76° a -55.05° y longitud -53.63° a -73.56° , y su superficie continental es de $2.791.810 \text{ km}^2$. Gracias a esta amplitud, Argentina tiene una diversidad de zonas geográficas caracterizadas por distintas topografías y climas. El centro-este de Argentina es una zona de llanuras y clima húmedo en la pampa este y seco en la pampa oeste; es la zona más poblada del país y con mayor producción agropecuaria. Al sur, la meseta patagónica se extiende desde el pie de la Cordillera de Los Andes hasta el océano Atlántico; el clima es frío, seco y con vientos intensos, en general es una zona con poca población. La zona centro-oeste y noroeste del país se caracteriza por su topografía cordillerana y altos picos montañosos como el Aconcagua con 6961 msnm ; al norte se encuentra una región de meseta llamada Puna o Altiplano. La Cordillera tiene una gran influencia sobre el clima, ya que bloquea la humedad de los vientos que vienen del Océano Pacífico; en consecuencia el clima de las regiones que se extienden a lo largo de la Cordillera es seco. En el norte del país, en la región chaqueña y mesopotámica, la vegetación es boscosa y selvática respectivamente; el clima es subtropical y muy húmedo.

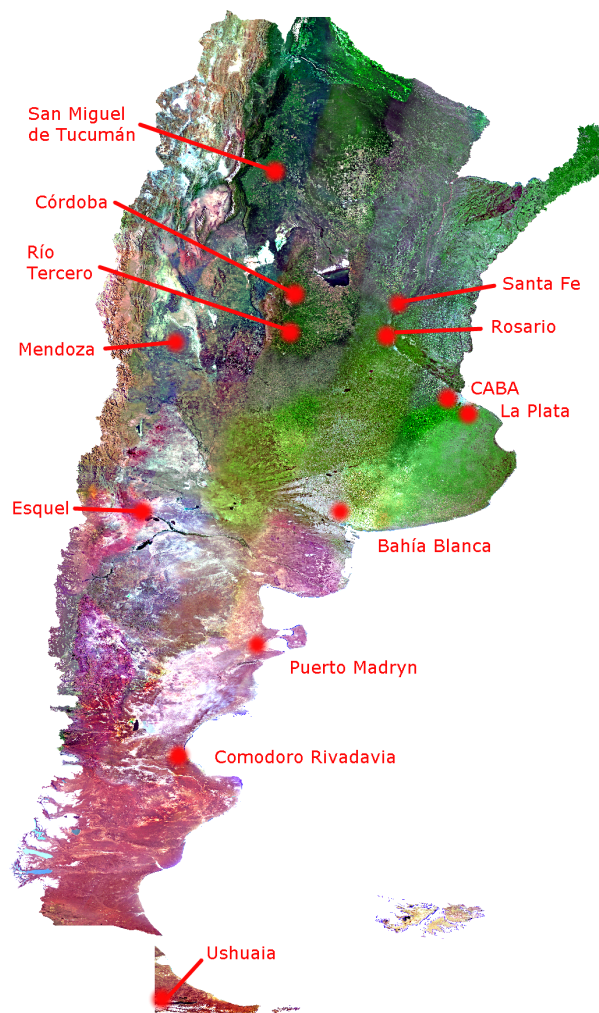


FIGURA 2.1: Mosaico de Argentina, obtenido de imágenes del satélite SAC-C.

2.2 Calidad del aire en Argentina

En los últimos años, la calidad del aire en Argentina fue adquiriendo mayor importancia con la medición y estudio de contaminantes atmosféricos. Las agencias ambientales regionales comenzaron a monitorear continuamente contaminantes en las principales ciudades del país, donde se concentra la población y la actividad industrial. La imagen que emerge es similar a otros lugares contaminados del mundo con niveles críticos de óxidos de nitrógeno (NO y NO_2 , mayores a $400 \mu\text{g}/\text{m}^3$, Venegas y Mazzeo, 2006) y material particulado (niveles de $\text{PM}_{2.5}$ promedio mayores a $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$ durante el verano, Bogo et al., 2003). Por otra parte, la implementación de inventarios de emisión de gases a la atmósfera y el uso de modelado todavía son rudimentarios. Este trabajo es el primer estudio que simula niveles de calidad del aire a escala nacional.

Anteriores estudios de la calidad del aire en Argentina estuvieron enfocados en las principales ciudades que se muestran en la Figura 2.1. El área metropolitana de Buenos Aires (AMBA), una mega ciudad de 12.8 millones de habitantes (INDEC, 2010), fue el principal caso de estudio que involucró inventarios de emisión (Weaver y Balam, 1999; Mazzeo y Venegas, 2003; D'Angiola et al., 2010; Puliafito, 2009; Allende et al., 2012), modelados de dispersión de contaminantes (Pineda Rojas y Venegas, en prensa; Venegas y Mazzeo, 2006; Bogo et al., 2001; Allende et al., 2012), campañas de medición de campo (Reich et al., 2006; Bogo et al., 1999; Jasan et al., 2009; Gallardo et al., 2012), estudio de la altura de la capa límite (Ulke y Mazzeo, 1998), y la observación y análisis de la profundidad óptica de aerosoles (del inglés AOD, *aerosol optical depth*) (Ristori et al., 2003, Ipiña et al., 2012).

En Buenos Aires los niveles de contaminantes primarios más altos se obtuvieron cerca de las estaciones de trenes más grandes, donde el monóxido de carbono de fondo puede alcanzar valores cercanos a 4 ppm y el NO_x de fondo puede ser aproximadamente de $400 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Venegas y Mazzeo, 2006). La principal fuente de CO, NO_x y PM2.5 es el tránsito vehicular (Bogo et al., 1999), aunque la erosión y resuspensión del suelo por los vientos también se consideran fuentes importantes de PM2.5 (Bogo et al., 2003). Durante el verano, los mayores valores de concentración de O_3 1-hora varían entre 15 ppb en las zonas más urbanizadas a 53 ppb en áreas barriales (50-60 km en dirección del viento desde el centro urbano) (Pineda Rojas y Venegas, en prensa). El material particulado muestra altos niveles durante el verano (medias alrededor de $41 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para PM2.5 y $52 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para PM10), y en invierno estos niveles son todavía altos (medias de $33 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para PM2,5 y $44 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para PM10). A menudo, los niveles de concentración de PM2.5 son cercanos o mayores a los valores límites planteados por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EE.UU. - EPA) (Bogo et al., 2003), ver en la próxima sección 2.1.

Numerosos indicadores ambientales de salud para contaminación del aire presentan a Buenos Aires como una de las ciudades de latinoamérica con los peores niveles de exposición a PM10 (Bell et al., 2011). Generalmente, los contaminantes atmosféricos en este área no se acumulan debido a su topografía plana y a las altas velocidades del viento, aunque cuando éste disminuye lo suficientemente se pueden observar altos valores de contaminantes (Bogo et al., 1999). Los mayores valores medios horarios durante el

día de altura de mezclado, para verano e invierno, son respectivamente 1170 y 592 m (Ulke y Mazzeo, 1998).

Córdoba, la segunda ciudad en población de Argentina (1,3 millones de habitantes, INDEC 2010), está rodeada por montañas que causan inversión radiativa durante el invierno, atrapando los contaminantes atmosféricos en una delgada capa de 200 m de altura sobre la superficie (Stein y Toselli, 1996; Olcese y Toselli, 2002). La principal fuente de emisiones es el tránsito representando un 85% del total. Esto afecta seriamente la zona céntrica de la ciudad (Stein y Toselli, 1996). La caracterización de la composición elemental de aerosoles permitió caracterizar al tránsito y al polvo de las calles y las construcciones como las más importantes fuentes de material particulado. Más del 66% de la composición de PM10 (con una media de $107 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para 10 meses) corresponde a PM2.5 (López et al., 2011). El monitoreo de contaminantes primarios revela que los valores estándares de calidad del aire se superan con frecuencia. El nivel de O_3 troposférico es bajo en la ciudad, debido a la gran emisión de NO producida por el parque automotor, aunque éste se incrementa en los alrededores ya que sus precursores son transportados por el viento (Olcese y Toselli, 2002). El empleo de técnicas de biomonitoreo revela niveles críticos de metales pesados (Carreras y Pignata 2002) y de la genotoxicidad del material particulado (Carreras et al., 2006) que puede impactar en la salud de la población por exposición crónica a estos contaminantes.

Rosario, una ciudad de 1,2 millones de habitantes (INDEC, 2010), se encuentra a orillas del río Paraná, una importante vía de navegación fluvial. Su clima es templado y húmedo, con vientos predominantes del Sur que oscilan en los 10 km/h. La zona tiene una alta frecuencia de precipitaciones que alcanza los 1038 mm al año. La cercanía de Rosario con el río Paraná, conjuntamente con su distribución a lo largo de la costa, le permiten tener una buena capacidad de desalojo de los contaminantes del aire (Andrés et al., 2006). En la ciudad se realiza el monitoreo pasivo de óxidos de nitrógeno desde el año 1994. La mayor fuente de emisiones identificada es el tránsito, con una alta concentración de vehículos particulares y de transporte público (Andrés et al., 2006). El microcentro de la ciudad, donde se desarrolla una intensa actividad comercial y de servicios, se caracteriza por la presencia de edificación en altura que dificulta la dispersión de contaminantes. La concentración de NO_2 varía de más de $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$ en el invierno a menos de $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ en el verano (Andrés et al., 2013), y su media anual muchas veces

coincide con los límites admitidos por las ordenanzas municipales (Andrés et al., 2006), ver en la próxima sección 2.1.

El área metropolitana de Mendoza (la cuarta más grande en el país, con 850.000 habitantes, INDEC 2010) es adyacente a la Cordillera de Los Andes, que tiene una gran influencia sobre la meteorología local y, por lo tanto, sobre la calidad del aire. El clima es semiárido con temperaturas muy elevadas en el verano y muy bajas durante el invierno. Las precipitaciones apenas superan los 250 mm anuales. Aunque en esta zona se desarrolla el viento Zonda, el promedio de la velocidad de vientos durante el año alcanza los 4,2 km/h (Andrés et al., 2010). Las actividades industriales intensivas e intermedias, junto con las emisiones de tránsito del centro de la ciudad y las fuentes residenciales, impactan sobre la calidad del aire (Puliafito et al., 2003). Estudios previos involucraron la construcción de un inventario de emisiones (Fernández et al., 2010; Puliafito y Allende 2007) y su implementación en el modelado de dispersión (Puliafito y Allende 2007) y de transporte químico (Fernández et al., 2010). Durante el verano, la circulación montaña-valle ventila la ciudad, mientras que durante el invierno hay episodios de estancamiento del aire produciendo los mayores niveles de O_3 a nivel superficial (un estudio durante el invierno del año 1996 mostró que el O_3 alcanzó un nivel de $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (Schlink et al., 1999). Micheletti et al. (2012) midió bajas concentraciones de PM_{10} en el Observatorio Pierre Auger (Malargüe, Provincia de Mendoza, 421 km al sur de la ciudad de Mendoza), $25 \mu\text{g}/\text{m}^3$ en una base horaria durante el verano, con una fracción del 30% de $PM_{2.5}$. Se observó una tendencia general de aumento de PM_{10} de invierno a verano. Además, este trabajo involucró el estudio de su composición elemental que mostró la presencia de minerales de Los Andes (azufre, cloro, calcio, titanio, manganeso y hierro).

La Plata y Bahía Blanca, ciudades puerto, tienen las mayores refinerías de aceite y polos petroquímicos, respectivamente. La Plata también tiene una gran densidad de población con la mayor tasa automóvil/persona en Argentina (1 auto cada 2 personas). Las condiciones climáticas en La Plata producen inversiones durante el otoño e invierno, disminuyendo la dispersión de los contaminantes en la atmósfera (Orte, 2011). NO_x , SO_2 y NH_3 tienen sus mayores niveles en el polo petroquímico en Bahía Blanca, mientras se producen emisiones de CO principalmente en la ciudad y PM_{10} desde todas las fuentes relevantes (industrias, tránsito y erosión del suelo). Aunque el sitio está altamente industrializado, el impacto de estas emisiones en la calidad del aire es menor que el

de las emisiones producidas por el tránsito, debido a que las altas chimeneas dispersan los contaminantes con mayor eficiencia (Allende et al., 2010a). Se aplicó modelado de dispersión a Bahía Blanca, considerando las emisiones del polo industrial y el tránsito asociado con la ciudad y el puerto (Puliatifo y Allende, 1997; Allende et al., 2010a). El polo petroquímico en La Plata muestra altos valores de AOD. Valores diarios de PM10 excedieron los estándares locales de calidad del aire ($150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ promedio en 24 horas, Dec. Reg. 3395, 1996) en el 2010. La concentración de SO_2 nunca superó los valores estándares locales (140 ppb promedio en 24 horas) en el mismo período de tiempo; sin embargo, estos niveles sí superan los estándares de la Organización Mundial de la Salud (8 ppb promedio en 24 horas, OMS 2006) (Orte, 2011). El tránsito fue identificado como la principal fuente de COVs (compuestos orgánicos volátiles), con niveles similares a los informados en las mayores ciudades del mundo (Massolo et al., 2009). Por último, distintos estudios correlacionan la presencia y concentración de COVs, PM10 y HAPs (hidrocarburos aromáticos policíclicos) con efectos en la salud de la población local (e.g. Whichmann et al., 2009; Cianni et al. 2009, Massolo et al. 2009).

En la provincia de Tucumán, al norte de Argentina, la quema durante la zafra de la caña de azúcar y los incendios en la estación seca de invierno producen una contaminación intensa del aire junto con problemas de visibilidad e incidencia en enfermedades respiratorias (Piriz Carrillo et al., 2010; Cremades et al., 2011; Ipiña et al., 2012). Cremades et al. (2011) elaboró un inventario de emisiones de quema de biomasa para este área, donde se refleja una alta concentración de contaminantes, principalmente CO y material particulado.

Una de las más importantes fuentes de contaminantes atmosféricos en Argentina es la quema de biomasa antropogénica y natural, que contribuye a la carga regional y global de aerosoles. En el trabajo de Castro-Videla et al. (2013) se muestra que la mayor cantidad de incendios producidos en el norte del país (bosque chaqueño) ocurren en julio, mientras que en la región pampeana del centro-este alcanzan un pico en la primavera. Los mismos autores informan que la expansión de campos cultivados con soja y la cosecha de la caña de azúcar, actividades antropogénicas, son la principal causa de incendios.

Se elaboraron inventarios regionales de emisiones antropogénicas en Argentina

para las áreas de Buenos Aires (D'Angiola et al. 2010), Bahía Blanca (Allende et al., 2010b) y Mendoza (Fernández et al., 2010; Puliafito y Allende 2007). La Fundación Bariloche (2005) estimó un inventario de emisiones para todo el país (para la quema de combustibles fósiles, las misiones fugitivas y el transporte internacional) y debido a que los datos no se disponen sobre una grilla espacial no es posible todavía implementarlos en modelos de calidad del aire.

2.3 Legislación de contaminantes

Como se expuso en el Capítulo 1, altas concentraciones de contaminantes atmosféricos pueden tener efectos adversos sobre la salud de la población. Para evitar tales afecciones, y luego de realizar estudios epidemiológicos, distintos organismos ambientales y sanitarios de Argentina y el mundo establecen concentraciones límite para la exposición de las personas que no deben superarse, para distintos períodos de tiempo. Estas regulaciones deben ir acompañadas del monitoreo adecuado de las especies químicas en la atmósfera y de las acciones pertinentes a cada caso.

Las políticas ambientales y sanitarias sobre la calidad del aire son jurisdicción de cada país. En Argentina, las legislaciones son provinciales y deben tener en cuenta los riesgos para la salud, la actualización tecnológica disponible y aspectos económicos, políticos y sociales locales. Aún así, muchas provincias no reconocen a la contaminación atmosférica como un problema sobre el cual trabajar; otras, en cambio, se han dedicado al monitoreo y estudio de la situación, planteando una legislación más actualizada. Mientras la Organización Mundial de la Salud propone concentraciones límite para los contaminantes precursores de ozono troposférico, en base a distintos estudios sobre la calidad del aire y sus consecuencias para la salud, estas son muchas veces guías de recomendaciones a adoptar.

En la Tabla 2.1 se presentan los límites establecidos por la legislación de la Provincia de Buenos Aires (Decreto N° 3395/96 de la Ley N° 5965), la Ciudad Autónoma de Buenos Aires (Decreto N° 198/GCABA/06 que reglamenta a la Ley N°1.356), la Municipalidad de Rosario (Ordenanza N° 5820/1994), la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA, NAAQS) y la Organización Mundial de la Salud (OMS, 2006).

TABLA 2.1: Concentraciones límite establecidas por legislaciones argentinas, de Estados Unidos y de la Organización Mundial de la Salud.

Especie	Tiempo*	Concentración Límite				
		Pcia. de Bs. As.	Ciudad de Bs. As.	Rosario	EPA	OMS
NO ₂	1 año	53 ppb	53 ppb	-	53 ppb	21 ppb
	24 h	-	-	0.10 mg/m ³	-	-
	1 h	200 ppb	200 ppb	-	100 ppb	109 ppb
SO ₂	1 año	30 ppb	30 ppb	-	-	-
	24 h	140 ppb	140 ppb	0.05 mg/m ³	-	8 ppb
	3 h	500 ppb	500 ppb	-	500 ppb	-
	1 h	-	-	-	75 ppb	-
CO	8 h	9 ppm	9 ppm	-	9 ppm	9 ppm
	1 h	35 ppm	35 ppm	-	35 ppm	25 ppm
O ₃	24 h	-	-	0.03 mg/m ³	-	-
	8 h	-	80 ppm	-	75 ppb	100 µg/m ³
	1 h	120 ppb	120 ppb	-	-	-
PM10	24 h	150 µg/m ³	150 µg/m ³	150 µg/m ³	150 µg/m ³	50 µg/m ³
	1 año	50 µg/m ³	50 µg/m ³	-	-	20 µg/m ³
PM2,5	24 h	-	-	-	35 µg/m ³	-

* Período del tiempo sobre el cual el umbral indicado no debe violarse.

2.4 Recolección de datos meteorológicos y de calidad de aire para la evaluación del sistema de modelado

El sistema de modelado, que se describirá en el Capítulo 3, es evaluado en este trabajo contrastando los resultados obtenidos de las simulaciones con mediciones de campo tanto de variables meteorológicas como de monitoreo continuo de contaminantes químicos (Capítulo 5). De esta forma se puede conocer el nivel de desempeño y precisión de su aplicación sobre Argentina.

Para ello, una etapa importante del trabajo fue la recolección de datos meteorológicos y de calidad del aire medidos en Argentina por organismos públicos y centros de investigación. La tarea no sólo significó la solicitud de todos los datos de concentraciones atmosféricas conocidos, sino también lograr contactos con aquellas instituciones involucradas en los distintos procesos que afectan la calidad del aire, desde el control de las emisiones hasta el análisis de la calidad del aire incluyendo estudios de características locales y de eventos particulares. De esa forma, gran parte de la comunidad gubernamental y científica abocada a la temática conoció este estudio de tesis y se mostró muy colaborativa al respecto.

Así fue como se obtuvieron datos de distintas especies químicas, medidas en distintos períodos y frecuencias temporales y por diferentes métodos (Tabla [2.3](#)).

TABLA 2.2: Monitoreo de contaminantes en Argentina. a) Agencia de Protección Ambiental de la Gobernación de la Ciudad de Buenos Aires; b) *World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre*; c) Autoridad de Cuenca Matanza Riachuelo; d) Comité Técnico Ejecutivo de la Municipalidad de Bahía Blanca; e) Grupo de Estudios de la Atmósfera y el Ambiente de la Universidad Tecnológica Nacional Regional Mendoza; f) Centro de Investigaciones Ópticas de la Universidad Nacional de La Plata; g) Organismo Provincial para el Desarrollo Sostenible de la Provincia de Buenos Aires; h) Secretaría de Ambiente de la Provincia de Córdoba; i) Secretaría de Ambiente de la Municipalidad de Río Tercero; j) Grupo de Estudios Sobre Energía de la Universidad Tecnológica Nacional Regional Santa Fe; k) Ministerio de Ambiente y Obras Públicas de la Provincia de Mendoza; l) Programa *Global Environment Monitoring System* de las Naciones Unidas.

1- Datos disponibles; 2- Ozono, columna total; 3- Ozono troposférico de monitoreo continuo; 4- Ozonosondeo

Provincia	Localidad	Institución	Estación	Especies Monitoreadas								
				NO	NO ₂	SO ₂	NH ₃	COV _s	O ₃	CO	PM10	AOD
Ciudad Autónoma de Buenos Aires	Ag. Prot. Amb. ^a		Parque Centenario ¹	×	×	-	-	-	-	×	×	-
			Palermo ¹	×	×	-	-	-	-	×	×	-
			Córdoba	×	×	-	-	-	-	×	×	-
			La Boca	×	×	-	-	-	-	×	-	-
	WOUDC ^b	STN 91	-	-	-	-	-	×	-	-	-	
Buenos Aires	Avellaneda	ACUMAR ^c	Dock Sud	×	×	×	-	×	×	×	×	-
	Burzaco		Area Ind. Alte. Brown	-	-	×	-	-	-	-	×	-
	Ingeniero White	CTE ^d	Campo Scout "E. Pilling"	×	×	×	-	-	×	×	×	-
			San Martín 3611	×	×	×	-	-	×	×	×	-
			Plaza Rivadavia	×	×	×	-	-	×	×	×	-
			Delegación Municipal	×	×	×	-	-	×	×	×	-

Sigue en la página siguiente.

Provincia	Localidad	Institución	Estación	Especies Monitoreadas								
				NO	NO ₂	SO ₂	NH ₃	COV _s	O ₃	CO	PM10	AOD
Buenos Aires	Ingeniero White	CTE ^d	CRIBABB	×	×	×	-	-	×	×	×	-
			Charlone y Ruta 3 Sur	×	×	×	-	-	×	×	×	-
			Club Náutico	×	×	×	-	-	×	×	×	-
			Club "Puerto Comercial"	×	×	×	-	-	×	×	×	-
			Consorcio Pque. Ind. ¹	×	×	×	-	-	×	×	×	-
		UTN Mendoza ^e	Consorcio Pque. Ind. ¹	×	×	×	×	-	×	×	×	-
	Lanús	ACUMAR ^c	Area Industrial Lanús	-	-	×	-	-	-	-	×	-
	La Plata	CIOp ^f	Estación CIOp ¹	-	-	-	-	-	×	-	-	×
	La Plata	OPDS ^g	Estación ODPS	?	?	?	?	?	?	?	?	?
	Villa Delfina	CTE ^d	Villa Delfina	×	×	×	-	-	×	×	×	-
	San Nicolás	OPDS ^g	Estación ODPS	?	?	?	?	?	?	?	?	?
	Virrey del Pino	ACUMAR ^c	Area Ind. La Matanza	-	-	×	-	-	-	-	×	-
Zárate/Campana	OPDS ^g	Estación ODPS	?	?	?	?	?	?	?	?	?	
Córdoba	Córdoba	Sec. Amb. Pcia. Cba. ^h	Móvil 1 ¹	×	×	×	-	×	×	×	×	-
	Pilar	WOUDC ^b	STN 442	-	-	-	-	-	×	-	-	-
	Río Tercero	Sec. Amb. Mun. ⁱ	Montegrande	-	×	×	×	-	-	-	-	-

Sigue en la página siguiente.

Provincia	Localidad	Institución	Estación	Especies Monitoreadas								
				NO	NO ₂	SO ₂	NH ₃	COV _s	O ₃	CO	PM10	AOD
Córdoba	Río Tercero	Sec. Amb. Mun. ⁱ	Shelter ¹	×	×	×	×	-	-	×	×	-
			Cabero	-	×	×	×	-	-	-	-	-
			B°El Libertador	-	×	×	×	-	-	-	-	-
			B°Pque. Montegrande	-	×	×	×	-	-	-	-	-
			5	-	×	×	×	-	-	-	-	-
Santa Fe	Santa Fe	UTN Santa Fe ^j	Salta y San Martín ¹	-	×	-	-	×	×			-
			25 de Mayo y Eva Perón ¹	-	×	-	-	×	×	×	×	-
			Rivadavia y Falucho ¹	-	×	×	-	×	×	×	×	-
			9 de Julio e Yrigoyen ¹	-	×	×	-	×	×	×	×	-
			Salta y San Jerónimo ¹	-	×	×	-	×	×	×	×	-
			1ª Junta y San Jerónimo ¹	-	×	×	-	×	×	×	-	-
			Suipacha y Rivadavia ¹	-	×	×	-	×	×	×	×	-
Mendoza	Agrelo	UTN Mendoza ^e	Azop ¹	-	-	-	×	-	-	-	-	-
	Mendoza	MAyOP ^k	Estación 9	-	×	×	-	-	-	-	×	-
			Estación 20	-	×	×	-	-	-		×	-
			Estación 21	-	×	×	-	-	-	-	×	-

Sigue en la página siguiente.

Provincia	Localidad	Institución	Estación	Especies Monitoreadas									
				NO	NO ₂	SO ₂	NH ₃	COV _s	O ₃	CO	PM10	AOD	
Mendoza	Mendoza	UTN Mendoza ^e	Estación 22	-	×	×	-	-	-	-	×	-	
	Pena		Baar ¹	-	-	-	×	-	-	-	-	-	
	San Martín		Junin ¹	-	-	-	×	-	-	-	-	-	
			Tresp ¹	-	-	-	×	-	-	-	-	-	
	Sauce		Sauce ¹	-	-	-	×	-	-	-	-	-	
Chubut	Com.Rivadavia	WOUDC ^b	STN 342	-	-	-	-	-	× ²	-	-	-	
	Esquel	GEMS- AIRE ^f	B°Malvinas	-	-	-	-	-	-	-	×	-	
			Antena	-	-	-	-	-	-	-	×	-	
	Puerto Madryn		Hospital	-	-	-	-	-	-	-	-	×	-
			Municipio	-	-	-	-	-	-	-	-	×	-
	Trelew		Gimnasio	-	-	-	-	-	-	-	-	×	-
			Hospital	-	-	-	-	-	-	-	-	×	-
			Seccional	-	-	-	-	-	-	-	-	×	-
			Polideportivo	-	-	-	-	-	-	-	-	×	-
			B°Malvinas	-	-	-	-	-	-	-	-	×	-
			Antena	B°Malvinas	-	-	-	-	-	-	-	-	×
Antena				-	-	-	-	-	-	-	-	×	-

Sigue en la página siguiente.

Provincia	Localidad	Institución	Estación	Especies Monitoreadas								
				NO	NO ₂	SO ₂	NH ₃	COV _s	O ₃	CO	PM10	AOD
Santa Cruz	Río Gallegos	WOUDC ^b	STN 493	-	-	-	-	-	× ²	-	-	-
	San Julián		STN 426	-	-	-	-	-	× ²	-	-	-
Tierra del Fuego	Ushuaia		STN 339 ¹	-	-	-	-	-	× ^{2 4}	-	-	-

En función de los datos disponibles, se eligió el período 1 de marzo a 31 de mayo del año 2009 para la aplicación del sistema de modelado y el uso de datos medidos con frecuencia horaria. Se solicitaron también los datos meteorológicos con frecuencia horaria para este mismo período y los mismos lugares.

Finalmente los datos que se utilizaron para la evaluación del sistema de modelado son los presentados en la Tabla 2.3.

TABLA 2.3: Datos de campo utilizados en este trabajo.

Parámetros	Buenos Aires	Córdoba	Bahía Blanca
CO	X	X	X
NO	X	X	-
NO ₂	X	X	-
NO _x	X	X	X
SO ₂	-	X	X
O ₃	-	-	X
PM10	-	X	X
Temperatura	X	X	X
Presión	X	X	X
Velocidad del viento	X	X	X
Dirección del viento	X	X	X

Se utilizaron en este trabajo las mediciones realizadas por las siguientes instituciones:

- Agencia de Protección Ambiental, del Gobierno de la Ciudad de Buenos Aires
- Secretaría de Ambiente, de la Municipalidad de Córdoba
- Comité Técnico Ejecutivo, de la Municipalidad de Bahía Blanca
- Servicio Meteorológico Nacional

Los datos de monitoreo continuo de especies químicas en la atmósfera, para el año 2009, son los presentados en la Figura 2.2.

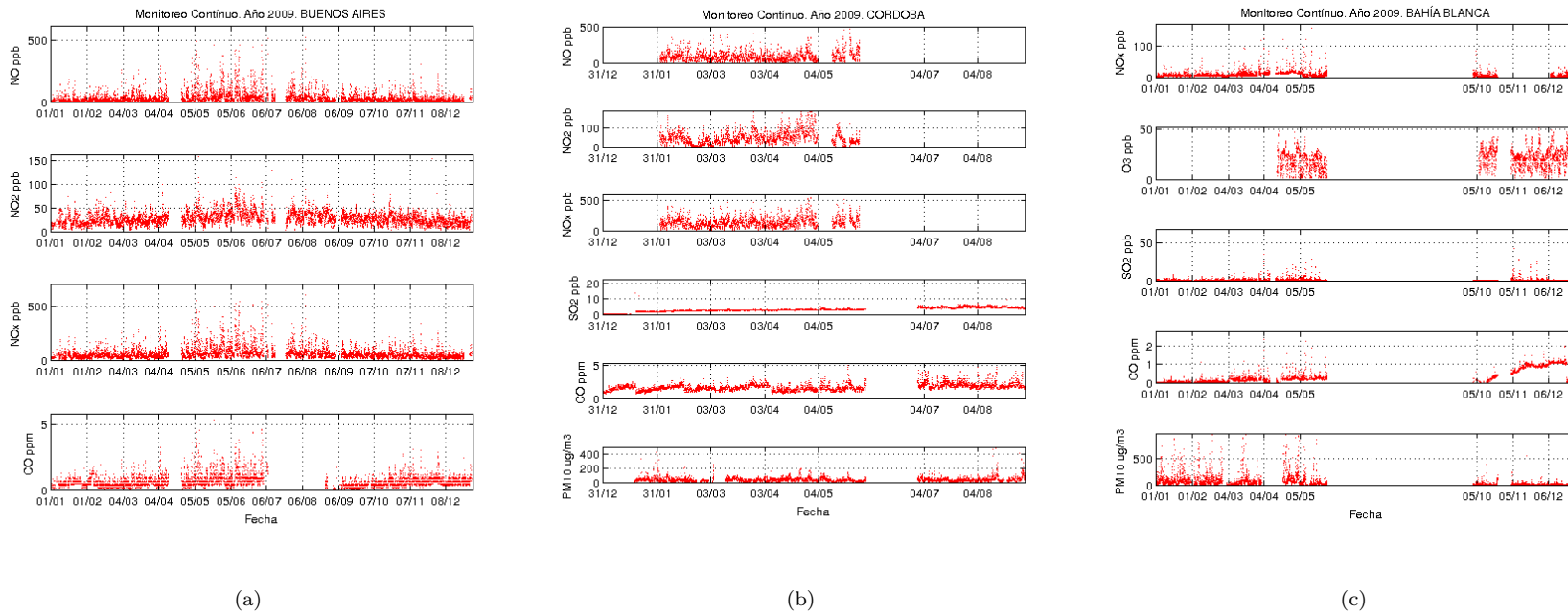


FIGURA 2.2: Datos de estaciones de monitoreo continuo de los sitios elegidos para la validación. a) Buenos Aires, b) Córdoba y c) Bahía Blanca. Año 2009.

2.4.1 Características de los sitios de monitoreo

Previamente, en este capítulo, se presentaron las principales características de la calidad del aire en Argentina. En esta oportunidad, se mencionarán las particularidades de los sitios donde se ubican las estaciones de monitoreo de calidad de aire y meteorología de los tres lugares mencionados.

2.4.1.1 Buenos Aires

El sitio de monitoreo continuo de la calidad del aire se ubica en el Parque Centenario (34.61°S , 58.43°O y altitud de 25 msnm sobre el nivel del mar). La Agencia de Protección Ambiental del Gobierno de la ciudad caracteriza al área como residencial-comercial con flujo vehicular medio y muy escasa incidencia de fuentes fijas.

Uno de los estudios (Bogo et al. 2003) que caracteriza la contaminación en la ciudad de Buenos Aires, muestra la frecuencia de vehículos por hora que circula en la calle Junín, en el año 1999, junto con las concentraciones registradas de CO (Figura 2.3).

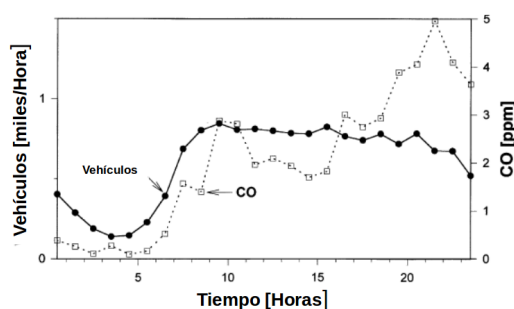


FIGURA 2.3: Frecuencia de vehículos por hora que circulan durante un día en la calle Junín, junto con registros de concentración de CO, para el año 1999 (adaptado de Bogo et al., 2003).

La estación meteorológica se ubica en el Aeroparque Metropolitano Jorge Newbery (34.56°S , 58.41°O), a orillas del Río de La Plata, cercano al Puerto de Buenos Aires y emplazado en zona urbana. Dicha estación se encuentra a aproximadamente 5 km de la estación de monitoreo continuo de contaminantes atmosféricos.

2.4.1.2 Córdoba

El sitio de monitoreo de la calidad del aire se caracteriza por estar en el centro de la ciudad (31.42°S , 64.19°O y altitud de 425 msnm sobre el nivel del mar), con alta circulación vehicular. Las emisiones vehiculares en el centro de Córdoba tienen un perfil horario particular relacionado al desarrollo tanto de actividades laborales como de esparcimiento. En las siguientes figuras se muestra la cantidad de vehículos por hora y el tipo de vehículos (Figura 2.4).

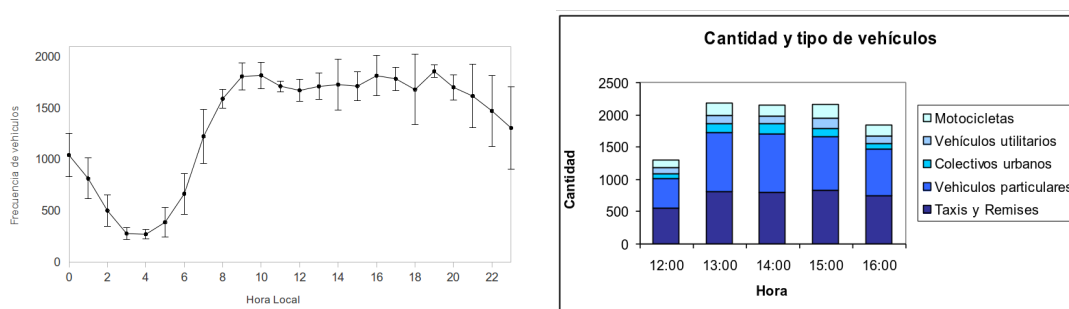


FIGURA 2.4: Promedio de la a) frecuencia de vehículos y b) tipo de vehículos en el sitio de muestreo, para los días hábiles (lunes a viernes), para el año 2007 (García Ferreyra, 2008).

La estación meteorológica de Córdoba se encuentra en el aeropuerto de la ciudad, ubicado en la salida norte de la ciudad (31.32°S , 64.22°O y altitud de 493 msnm sobre el nivel del mar), a 12 km de distancia del sitio de monitoreo de contaminantes atmosféricos.

2.4.1.3 Bahía Blanca

El sitio de monitoreo de gases contaminantes se ubica en la localidad de Ingeniero White (38.79°S , 62.27°O), muy cercano a la ciudad de Bahía Blanca. El interés de parte de las autoridades, de controlar las emisiones de este sitio reside en la presencia de un puerto y un polo petroquímico importante asociado al puerto.

De igual forma que en los sitios anteriores, la estación meteorológica se ubica en el aeropuerto local, ubicado a 38.72°S , 62.16°O , a 12 km del sitio de monitoreo de contaminantes.

2.4.1.4 Características generales de los sitios de monitoreo, para la evaluación del Sistema de Modelado

Los tres sitios presentados tienen características de alta contaminación por tránsito vehicular (Córdoba y Buenos Aires) e industrial (Bahía Blanca). No se encontraron mediciones en terreno de calidad del aire representativas de zonas con bajas emisiones antropogénicas que puedan ser comparadas con las simulaciones realizadas en este trabajo, ni mediciones de otros sitios con realidades de contaminación atmosférica conocidas. Esto se debió a distintos motivos: hubo dificultades en el acceso a esos datos; algunas otras mediciones no estaban validadas por la institución correspondiente, o simplemente no hay registro de mediciones en prácticamente todo el territorio del país. Estas cuestiones acotan el análisis que pueda hacerse del desempeño del sistema de modelado. Por otro lado, el hecho de que este estudio no pueda hacerse con datos más actuales es debido a la interrupción en las mediciones de parámetros de calidad del aire en la ciudad de Córdoba después del año 2009. Se priorizó este sitio de monitoreo, no sólo por sus conocidos altos niveles de contaminación, sino porque significaba un sitio con características geográficas diferentes respecto de los otros dos.

Capítulo 3

Sistema de modelado

3.1 Sistema de modelado de la calidad del aire

La calidad del aire depende de las emisiones de contaminantes a la atmósfera, producto de las actividades antropogénicas y los procesos biofísicos en ambientes naturales, de las condiciones meteorológicas presentes y procesos físico-químicos de generación, nucleación y remoción de especies.

En este trabajo se implementa el sistema de modelado WRF-CHIMERE-EDGAR (Figura 3.1) integrado por el modelo de transporte químico CHIMERE, el modelo meteorológico WRF (del inglés *Weather Research and Forecasting*) y el inventario de emisiones antropogénicas global EDGAR (del inglés *Emission Database for Global Atmospheric Research*), para la obtención de mapas con las concentraciones de especies químicas y material particulado sobre el dominio espacial elegido.

En términos generales, el inventario de emisiones EDGAR alimenta al modelo CHIMERE con una base de datos de emisiones de contaminantes primarios grillados; los resultados de las simulaciones obtenidas del modelo WRF otorgan a su vez las condiciones meteorológicas que considerará CHIMERE para transportar a los contaminantes en la atmósfera mientras éste calcula las concentraciones de nuevos contaminantes secundarios producto de las reacciones presentadas en el Capítulo 1.

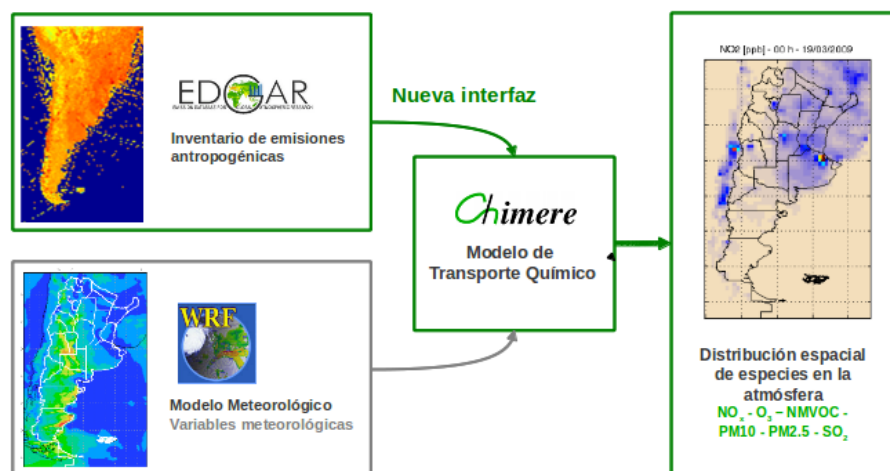


FIGURA 3.1: El sistema de modelado WRF-CHIMERE-EDGAR.

Como fue mencionado anteriormente, este trabajo es el primero en estimar concentraciones de contaminantes sobre el territorio nacional y además el primero en implementar CHIMERE fuera del continente europeo. Esto es posible gracias al desarrollo de la interfaz entre EDGAR y CHIMERE, que no había sido realizada anteriormente (la construcción de la interfaz se muestra en el Capítulo 4).

3.1.1 Dominio espacial

Como fue mencionado en el Capítulo 2, el dominio espacial definido para la realización de los mapas de calidad del aire de este trabajo incluye el territorio nacional continental. Necesariamente, el dominio del modelo de transporte químico debe estar incluido en el del modelo meteorológico. Entonces, para WRF las celdas utilizan una proyección geográfica conformacional de Lambert con una resolución horizontal de 30×30 km y vertical de 28 niveles hasta alcanzar una presión de 50 hPa (20 km aproximadamente). CHIMERE, en cambio, fue configurado para que su resolución horizontal sea de $0.5 \times 0.5^\circ$ (55 km aproximadamente) debido a la gran extensión del dominio, y de 8 niveles verticales que se distribuyen geoméricamente desde el interior de la capa límite atmosférica a 997 hPa hasta la primera mitad de la tropósfera a 500 hPa (136 m y 5.5 km respectivamente). Ambos modelos utilizan coordenadas verticales de presión hidrostática que siguen la forma del terreno. La definición de ambos dominios puede observarse en la Figura 3.2.

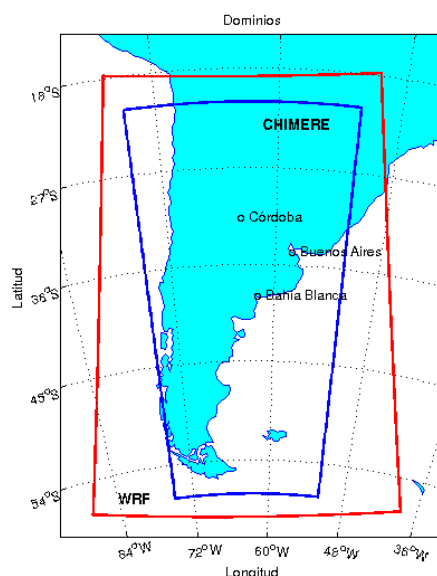


FIGURA 3.2: El dominio de modelado para WRF y CHIMERE.

3.1.2 Período de tiempo de simulación

De acuerdo a los datos de monitoreo meteorológicos y de especies químicas obtenidos para los tres sitios de validación, se definió el período de tiempo de simulación desde el 1 de marzo al 31 de mayo del 2009, aunque las simulaciones comenzaron a realizarse desde el día 15 de febrero para estabilizar el sistema de modelado. Se decidió realizar simulaciones de dos días para CHIMERE y de 30 horas para WRF, empezando 6 horas antes del inicio de simulación de CHIMERE. El paso del tiempo se definió de 1 h para ambos modelos.

3.2 Implementación y aplicación de un modelo meteorológico: WRF

3.2.1 Descripción de WRF

El Manual de Descripción Técnica de WRF, presenta al modelo como un sistema numérico de predicción del tiempo y de simulación atmosférica de próxima generación, diseñado para investigación y aplicaciones operacionales.

Las instituciones involucradas en el diseño de WRF son estadounidenses:

- la División de Meteorología de Micro y Mesoescala (MMM) de la *National Center for Atmospheric Research* (NCAR);
- los centros *National Centers for Environmental Prediction* (NCEP) y *Earth System Research Laboratory* (ESRL) de la *National Oceanic and Atmospheric Administration* (NOAA);
- la Agencia Meteorológica de la Fuerza Aérea (AFWA) y Laboratorio de Investigación Naval (NRL) del Departamento de Defensa;
- el Centro para el Análisis y Predicción de Tormentas (CAPS) de la Universidad de Oklahoma;
- la Administración de Aviación Federal (FAA), y la participación de investigadores universitarios.

WRF puede ser utilizado principalmente para la simulación de mesoescala con resoluciones de grilla que pueden ir desde algunos metros a cientos de kilómetros. Sus principales aplicaciones incluyen:

- simulaciones idealizadas;
- análisis de parametrizaciones con distintas configuraciones;
- investigación en asimilación de datos;
- pronósticos del tiempo para investigación y en sistemas operativos;
- pronósticos a tiempo real;
- investigación de huracanes;
- aplicaciones de acoplamiento de modelos (sistemas *online*), y
- educación

El modelo meteorológico es de dominio público y se encuentra disponible de manera libre para el uso de la comunidad. La Figura 3.3 muestra el diagrama de flujo

general del sistema WRF para la versión 3 y, dentro del polígono verde, los componentes del sistema utilizados en este trabajo de tesis.

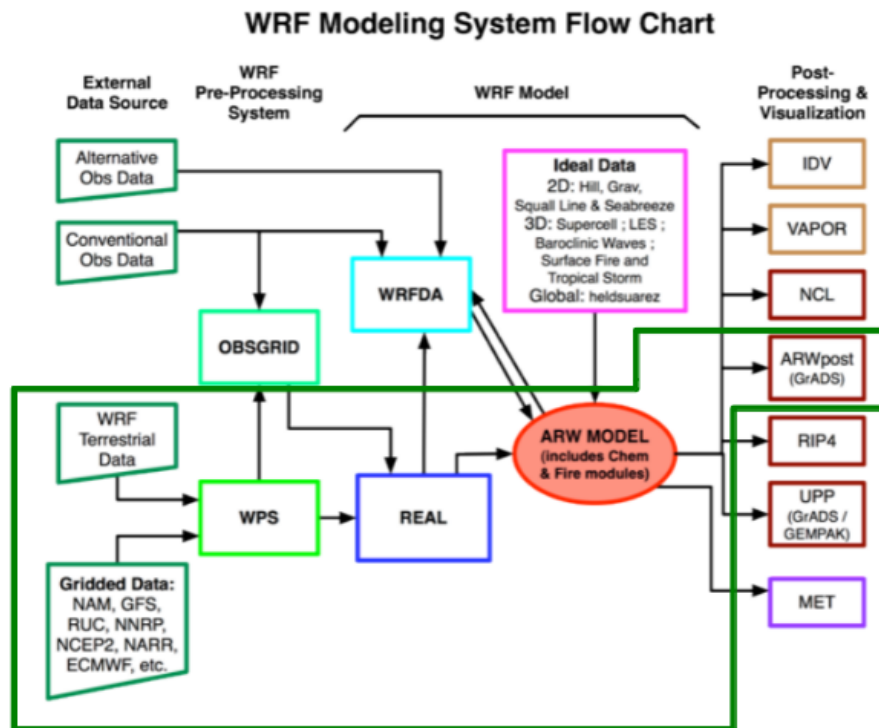


FIGURA 3.3: Diagrama de flujo del sistema de modelado WRF (adaptado del Manual de Usuarios ARW version 3, MMM y NCEP 2012). Dentro del polígono verde se muestra la fracción del diagrama utilizado en este trabajo.

Los principales programas del sistema de modelado de WRF son: WPS, ARW y herramientas de posprocesamiento y visualización.

3.2.1.1 WRF Preprocessing System (WPS)

Este programa se utiliza para definir dominios espaciales de simulación, interpolación de datos terrestres (terreno, uso de suelo, tipos de suelo, etc.) al dominio de simulación, traducción de los datos meteorológicos (condiciones iniciales) en formato GRIB y su interpolación al dominio definido. En este caso, WPS utiliza los siguientes datos:

- datos meteorológicos de análisis final NCEP FNL, en formato GRIB (un archivo cada 6 horas). ;

- usos de suelo categorizados por el USGS (del inglés *United States Geological Survey*) en 24 clases;
- proyección cartográfica Lambert Conformacional.

3.2.1.2 *Advanced Research WRF (ARW)*

El ARW es un componente clave del sistema de modelado que está compuesto por un programa de integración numérica y programas de inicialización para realizar simulaciones idealizadas y de casos reales.

Las características del funcionamiento del modelo, son presentadas por el Manual de Usuarios de WRF:

- El conjunto de ecuaciones que utiliza ARW es completamente comprimible, euleriano y no hidrostático (con opción de configuración hidrostática).
- Puede utilizarse para aplicaciones regionales y globales.
- Es conservador para variables escalares.
- Los términos de curvatura y fuerza de Coriolis es completa.
- El modelo usa coordenadas verticales de presión hidrostática que siguen al terreno (η) con una superficie de presión constante en el último nivel vertical.
- La grilla horizontal se define del tipo Arakawa-C.
- Para la integración del tiempo se utiliza el esquema de tercer orden Runge-Kutta, mientras que la discretización espacial emplea esquemas de segundo y sexto orden.
- El modelo presenta opciones físicas para superficie de suelo, capa límite atmosférica, radiación atmosférica y superficial, microfísica y convección de cumulus.
- El modelo puede ser utilizado para aplicaciones idealizadas y de datos reales con varias opciones de condición de contorno.
- El modelo también puede simular dominios anidados (definidos en el Capítulo 5) acoplados o no acoplados al dominio principal y móviles. Pueden emplearse varios

dominios anidados a la vez, incluso puede utilizarse un dominio anidado vertical desacoplado.

- Puede ser ejecutado desde computadoras con procesadores simples, compartidos o de memoria distribuida (este último fue el utilizado para la realización del trabajo presentado: la paralelización de 8 procesadores).

Como fue mencionado anteriormente, el modelo utiliza de entrada los análisis NCEP FNL *Operational Model Global Tropospheric Analyses* generados por la GDAS (Sistema de Asimilación de Datos Global, del inglés *Global Data Assimilation System*). Estos datos tienen una resolución espacial de $1^\circ \times 1^\circ$ y 52 niveles verticales (hasta una presión de 10 hPa). La frecuencia de obtención de los análisis es cada 6 horas.

3.2.2 Herramientas de visualización gráfica y de posprocesamiento

Los archivos de salida estándares de WPS, *real* y WRF se generan en formato NetCDF (*Network Common Data Form*), comúnmente utilizado en la comunidad meteorológica y de calidad del aire. La información contenida en los archivos puede ser visualizada con distintas herramientas gráficas: NCAR Graphics NCL, GrADS o RIP4. Aquí se empleó el visualizador GrADS (del inglés *Grid Analysis and Display System*), de distribución gratuita, que puede descargarse de su sitio de internet: www.iges.org/grads.

Más detalles acerca de las características y funcionamiento del modelo WRF pueden encontrarse en el Manual de Usuarios y el Manual Técnico, ambos disponibles en el sitio de internet: www.mmm.ucar.edu/wrf.

3.2.3 Configuración del modelo

Las simulaciones realizadas con WRF para llevar adelante este estudio tuvieron en cuenta las parametrizaciones estándares propuestas por el modelo. Dichas opciones se presentan en la Tabla 3.1. Luego, en el Capítulo 5 se muestran los resultados de aplicar modificaciones en la parametrización de la capa límite atmosférica junto con la capa de superficie

por un lado y, por el otro lado, la aplicación de un dominio anidado sobre la ciudad de Buenos Aires.

TABLA 3.1: Opciones físicas de configuración del modelo ARW

Parámetro	Nombre de la variable	Opción
Microfísica	mp_physics	WSM3
Radiación de onda larga	ra_lw_physics	RRTM
Radiación de onda corta	ra_sw_physics	Dudhia
Capa de superficie	sf_sfclay_physics	Monin-Obukhov
Superficie de suelo	sf_surface_physics	Noah LSM
Capa límite atmosférica	bl_pbl_physics	YSU
Parametrización de cumulus	cu_physics	Kain-Fritsch

Más detalles acerca de las opciones de configuración de los parámetros físicos pueden encontrarse en el Manual de Usuarios y el Manual Técnico, ambos disponibles en el sitio de internet: <http://www.mmm.ucar.edu/wrf>.

3.2.4 Simulaciones sobre el dominio espacial

La implementación del modelo meteorológico WRF sobre el territorio argentino, y posterior ejecución para un período temporal específico, produce la estimación de variables meteorológicas para cada punto de grilla horizontal, cada nivel vertical y cada paso del tiempo (frecuencia horaria). Así, la variación temporal cada 6 horas de las variables temperatura a 2 m, viento a 10 m y altura de la capa límite atmosférica, para el primer nivel vertical, pueden observarse en las Figuras 3.4 y 3.5.

3.3 Implementación y aplicación de un modelo de transporte químico: CHIMERE

3.3.1 Descripción

El modelo de transporte químico CHIMERE (Menut et al. 2013) está en desarrollo desde hace más de 15 años. Incluye las parametrizaciones de última generación para

T (°C) y viento (m/s) 19/03/2009

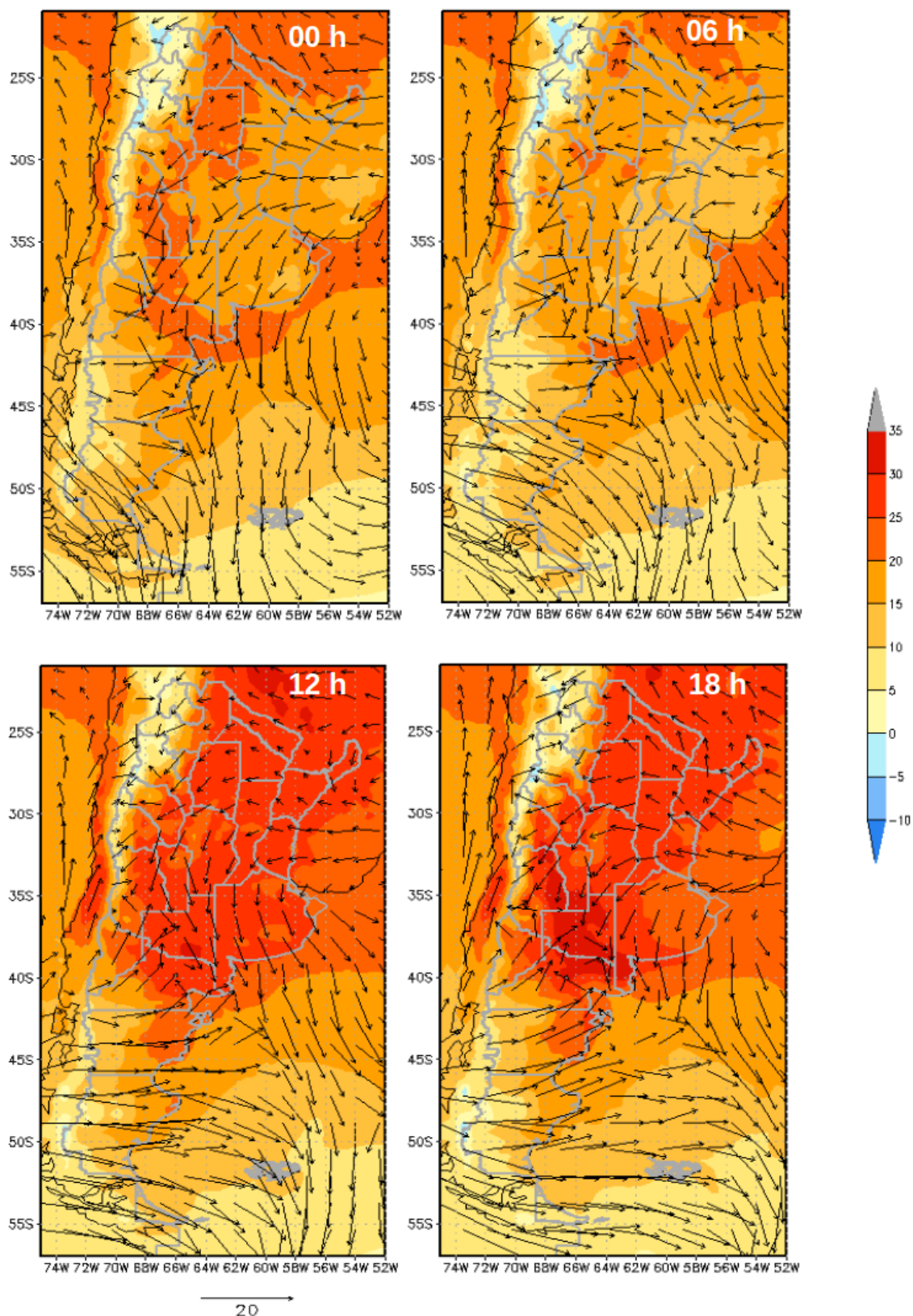


FIGURA 3.4: Mapas de salida de WRF para la temperatura [°C] a 2 metros de la superficie y viento [m/s] a 10 metros de la superficie, para el día para el día 19 de marzo de 2009 a las 00, 06, 12 y 18 hs respectivamente.

Altura capa límite (m) 19/03/2009

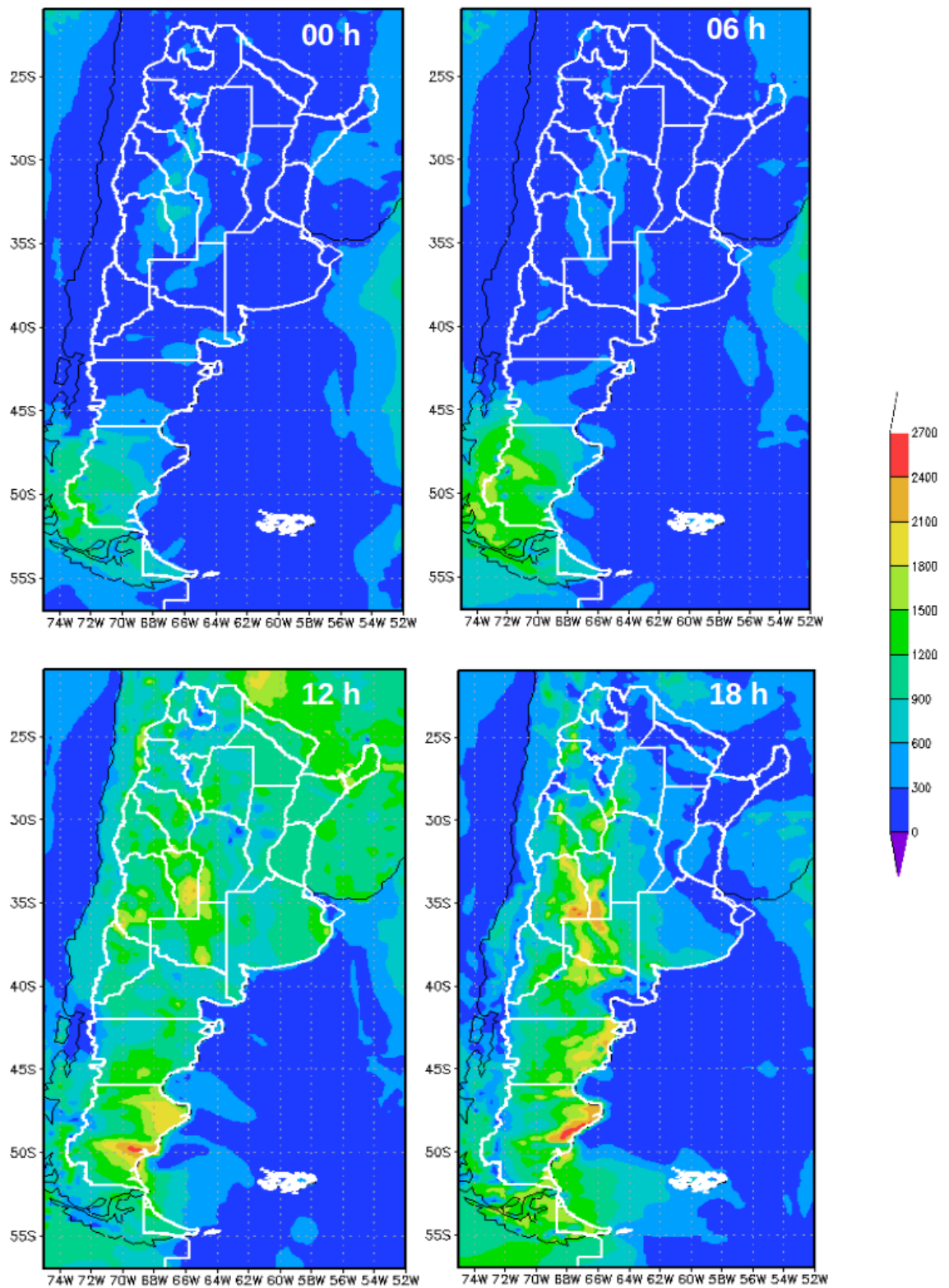


FIGURA 3.5: Mapas de salida de WRF para la altura de capa límite atmosférica [m], para el día para el día 19 de marzo de 2009 a las 00, 06, 12 y 18 hs respectivamente.

simular concentraciones de contaminantes razonables, y resulta computacionalmente eficiente para aplicaciones de pronóstico. CHIMERE además es usado frecuentemente para estudios de análisis en el campo experimental, transporte a grandes distancias y cuantificación de tendencias sobre escalas continentales.

CHIMERE es diseñado por el IPSL/LMD (*Institut Pierre Simon Laplace / Laboratoire de Météorologie Dynamique*), INERIS (*Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques*) y LISA (*Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques*), en Francia. El modelo se distribuye bajo Licencia General Pública de GNU, gracias a ello fue posible el desarrollo de la interfaz EDGAR-CHIMERE (que será presentada en el Capítulo 4) para realizar el trabajo de tesis.

El Manual de Usuarios de CHIMERE (IPSL, INERIS y LISA, 2011) lo presenta como un modelo de multi-escala diseñado para generar pronósticos diarios de la concentración de ozono, aerosoles y otros contaminantes y para hacer simulaciones prolongadas en el tiempo para escenarios de control de emisiones. Puede realizar simulaciones tanto de escalas espaciales regionales (varios miles de kilómetros) como de escalas urbanas (100-200 km con resoluciones desde 1-2 a 100 km).

3.3.1.1 Datos de entrada

Los datos necesarios para alimentar al modelo CHIMERE son meteorológicos, condiciones de contorno e iniciales, información de uso del suelo y emisiones. En la Figura 3.1 se muestra el esquema del sistema de modelado utilizado.

Emisiones: la base de datos utilizada es el inventario de emisiones antropogénicas global EDGAR versión 4.2, que aporta información sobre la distribución de fuentes de emisión, tipo de especies químicas y cantidad de éstas emitidas con una resolución espacial de $0,1^\circ$. Las especies disponibles en el inventario son: gases con efecto invernadero, precursoras de ozono troposférico, acidificantes, partículas y aerosoles primarios, es decir, sustancias que producen el agotamiento de ozono estratosférico. De todas formas, las especies utilizadas para alimentar al modelo CHIMERE son las precursoras de ozono troposférico y material particulado: monóxido de carbono (CO), amoníaco

(NH₃), compuestos orgánicos volátiles distintos al metano (COVDS), óxidos de nitrógeno (NO_x), y material particulado de diámetro aerodinámico de 10 μm (PM10).

Condiciones de contorno: Desde una configuración estándar, se utilizan condiciones de contorno de los modelos MOZART y LMDz-INCA.

Uso del suelo: CHIMERE necesita información del uso del suelo como entrada para calcular una cantidad de procesos, como la deposición, las emisiones biogénicas o la transferencia de calor. El modelo está preparado para que sólo tome la información de la base de datos del GLCF (*Global Land Cover Facility*) y emisiones biogénicas para Europa. Se deben encontrar otras metodologías para otras partes del mundo, en particular para construir potenciales de emisiones biogénicas. El uso de la base de datos GLCF puede facilitar el armado de nuevos archivos de uso de suelo para su aplicación en Argentina.

Meteorología: CHIMERE cuenta con la interfaz para utilizar los datos de salida del modelo meteorológico de mesoescala WRF (presentado anteriormente), que se utiliza en esta oportunidad. WRF genera los productos meteorológicos con frecuencia de 1 hora, en formato NetCDF; CHIMERE toma de ellos las variables vectores de viento, temperatura, humedad, presión y precipitaciones, entre otros.

Así, el modelo utiliza los datos de emisiones para transportarlas (difusión y advección) de acuerdo a las condiciones meteorológicas obtenidas del modelo WRF, a la información del terreno, mientras las especies químicas reaccionan (utilizando un conjunto de reacciones del mecanismo MELCHIOR, Menut et al. 2013), se consumen y producen otras nuevas y/o se depositan en la superficie por adsorción a material particulado (deposición seca) o por acción de la lluvia (deposición húmeda). Los aerosoles atmosféricos también sufren distintos procesos físicos durante su transporte. CHIMERE se configura para trabajar con un dominio que cubre toda la Argentina, contenido en el dominio establecido para WRF. En una instancia previa a la simulación, CHIMERE distribuye temporalmente los datos del inventario de emisiones, en los 12 meses del año y diariamente con una frecuencia horaria. Los resultados de las simulaciones coinciden temporalmente con las del modelo meteorológico: cada hora se obtiene un nuevo resultado de fracciones molares de las especies con una distribución espacial de resolución

horizontal de 0.5° y 8 niveles verticales que siguen el sistema de coordenadas verticales Sigma (que sigue al terreno) de 997 a 500 mbar.

3.3.1.2 Ecuaciones gobernantes

El modelo de transporte químico resuelve la ecuación de continuidad definida para especies químicas en la atmósfera: describe la conservación de la masa en el tiempo. CHIMERE es un modelo euleriano, por lo que resuelve la ecuación en cada celda de una grilla espacial dada. La ecuación de continuidad es:

$$\frac{\delta n}{\delta t} = -\nabla \cdot \mathbf{F} + P - L \quad (3.1)$$

donde $\frac{\delta n}{\delta t}$ representa la tendencia temporal local de la especie n ; n : $n(x, y, z, t, reacciones)$ es el número de densidad [$molec/cm^3$]; \mathbf{F} es el vector flujo [$molec/s\ cm^2$]; P es la producción de la especie n por reacción + emisión de la especie n , y L la pérdida de la especie n , por reacción o deposición.

Además, los términos Producción y Pérdida se definen respectivamente como:

$$\mathbf{P} = P_h + P_v \quad (3.2)$$

$$\mathbf{L} = L_h + L_v \quad (3.3)$$

donde P_h y P_v (también para L_h y L_v) denotan la evolución temporal de la concentración debida a la entrada horizontal (solo advección) y vertical (advección y difusión) a una celda dada.

3.3.2 Configuración del modelo

Las simulaciones realizadas con CHIMERE para llevar adelante este estudio tuvieron en cuenta las parametrizaciones estándares propuestas por el modelo. Dichas opciones se presentan en la Tabla 3.2. Luego, en el Capítulo 5 se muestran los resultados de aplicar modificaciones en la parametrización: el ensayo de aplicar un dominio anidado sobre la ciudad de Buenos Aires.

TABLA 3.2: Opciones de la química

Parámetro	Nombre de la variable	Opción
Mecanismo químico	mecachim	Melchior reduced
Aerosoles químicamente activos	aero	Sí
Cantidad de aerosoles de distinto tamaño	nbins	9
Sal marina	seasalt	No
Polvo	dust	No
Contaminantes orgánicos persistentes	pops	No
Especies carbonáceas primarias	carb	No
Marcadores gaseosos	gtrc	No
Marcadores de particulado	ptrc	No
Química de aerosoles orgánicos secundarios	soatyp	Esquema medio

Más detalles acerca de las opciones de configuración de los parámetros físicos pueden encontrarse en el Manual de Usuarios de CHIMERE (IPSL, INERIS y LISA. 2011) y en el trabajo de Menut et al. 2013.

3.3.3 Simulaciones sobre el dominio espacial

La implementación del modelo de transporte químico CHIMERE sobre el territorio argentino, y posterior ejecución para un período temporal específico, produce la estimación de concentraciones de numerosas especies químicas y material particulado para cada punto de grilla horizontal, cada nivel vertical y cada paso del tiempo (frecuencia horaria). Así, la variación temporal cada 6 horas de las especies NO₂, O₃ y PM10, para el primer nivel vertical, pueden observarse en las Figuras 3.6, 3.7 y 3.8.

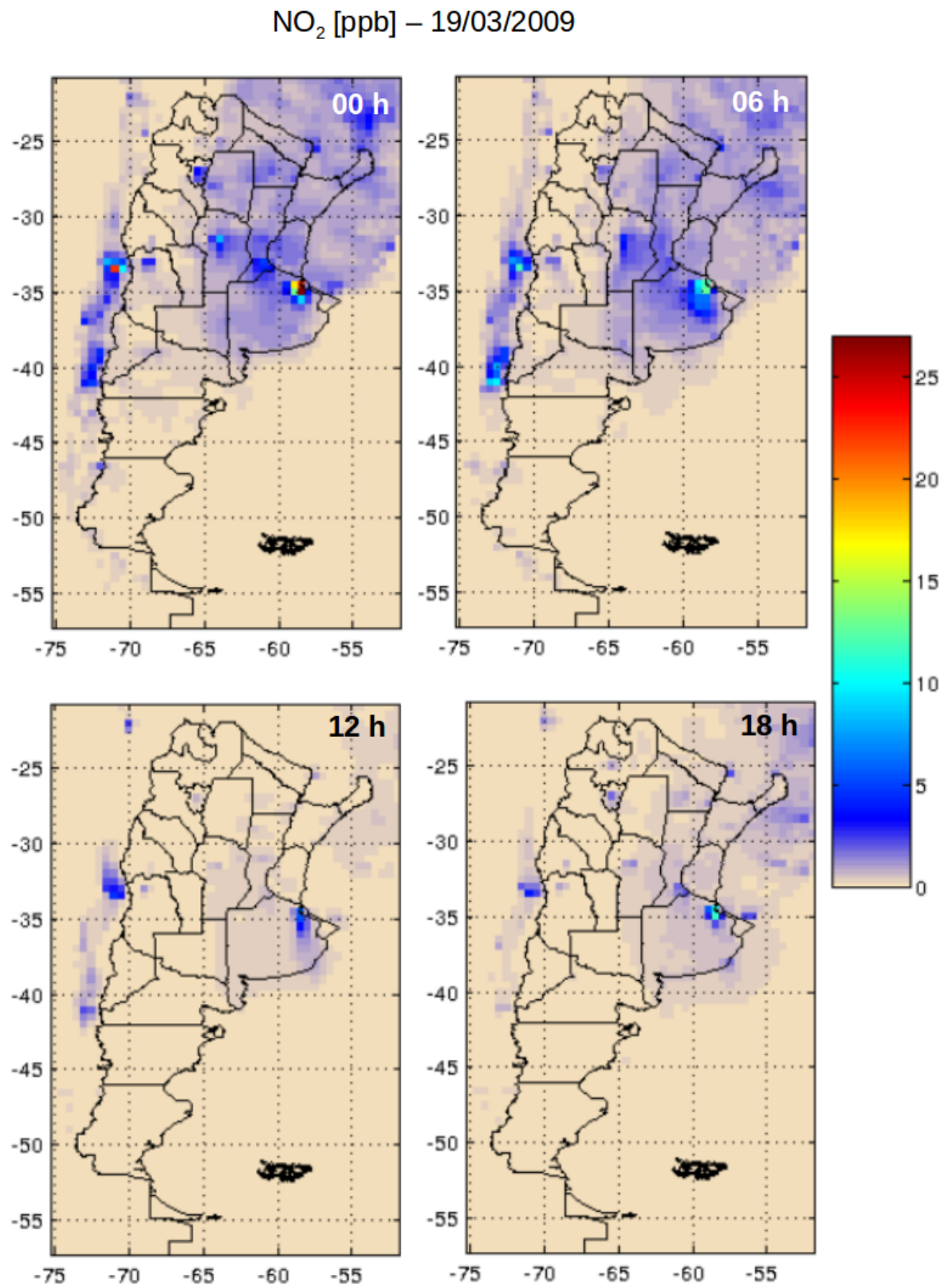


FIGURA 3.6: Mapas de salida de CHIMERE para NO_2 [ppb]. Se muestran los resultados simulaciones para el día 19 de marzo de 2009 a las 00, 06, 12 y 18 hs.

O₃ [ppb] – 19/03/2009

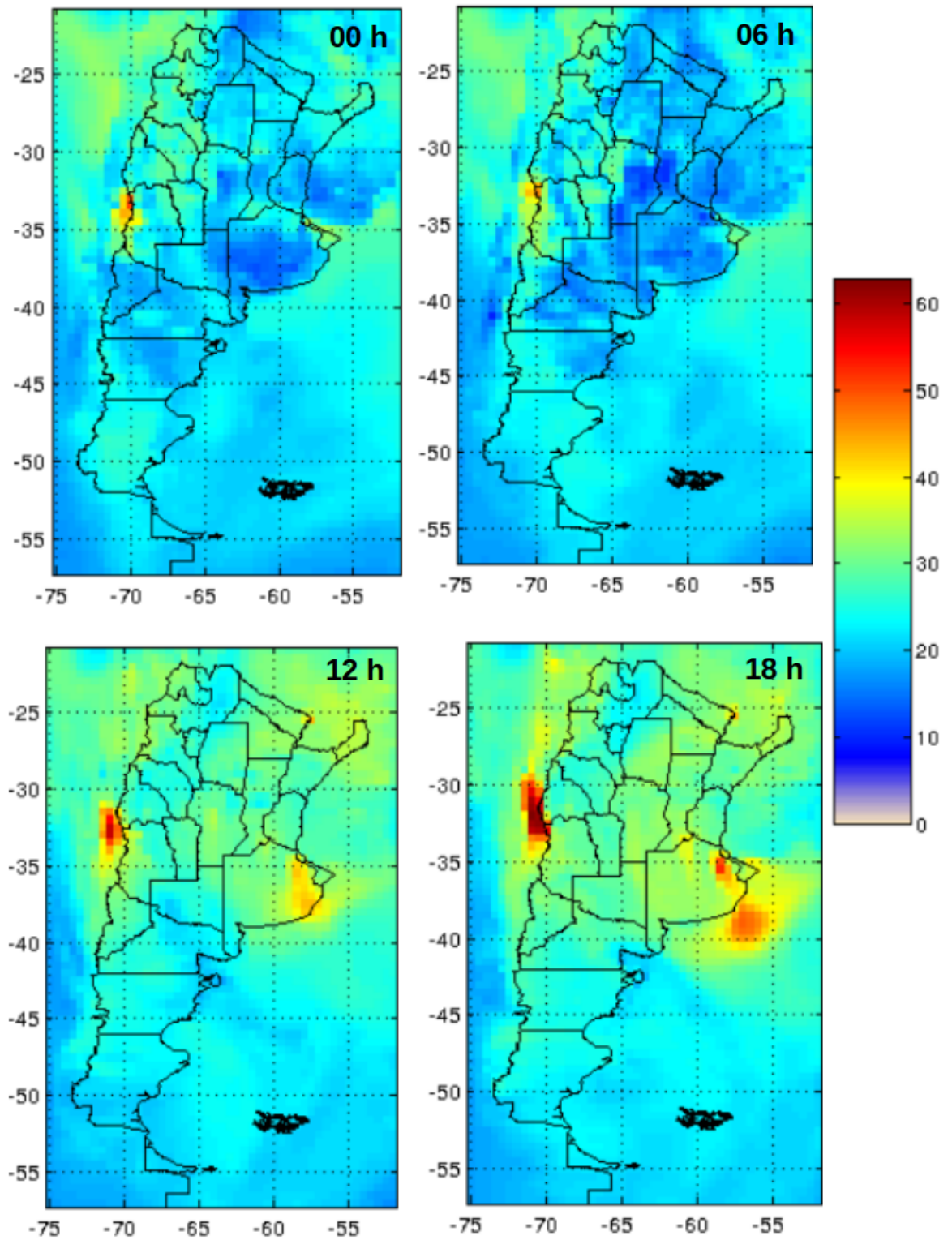


FIGURA 3.7: Mapas de salida de CHIMERE para O₃ [ppb]. Se muestran los resultados simulaciones para el día 19 de marzo de 2009 a las 00, 06, 12 y 18 hs.

PM10 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] – 19/03/2009

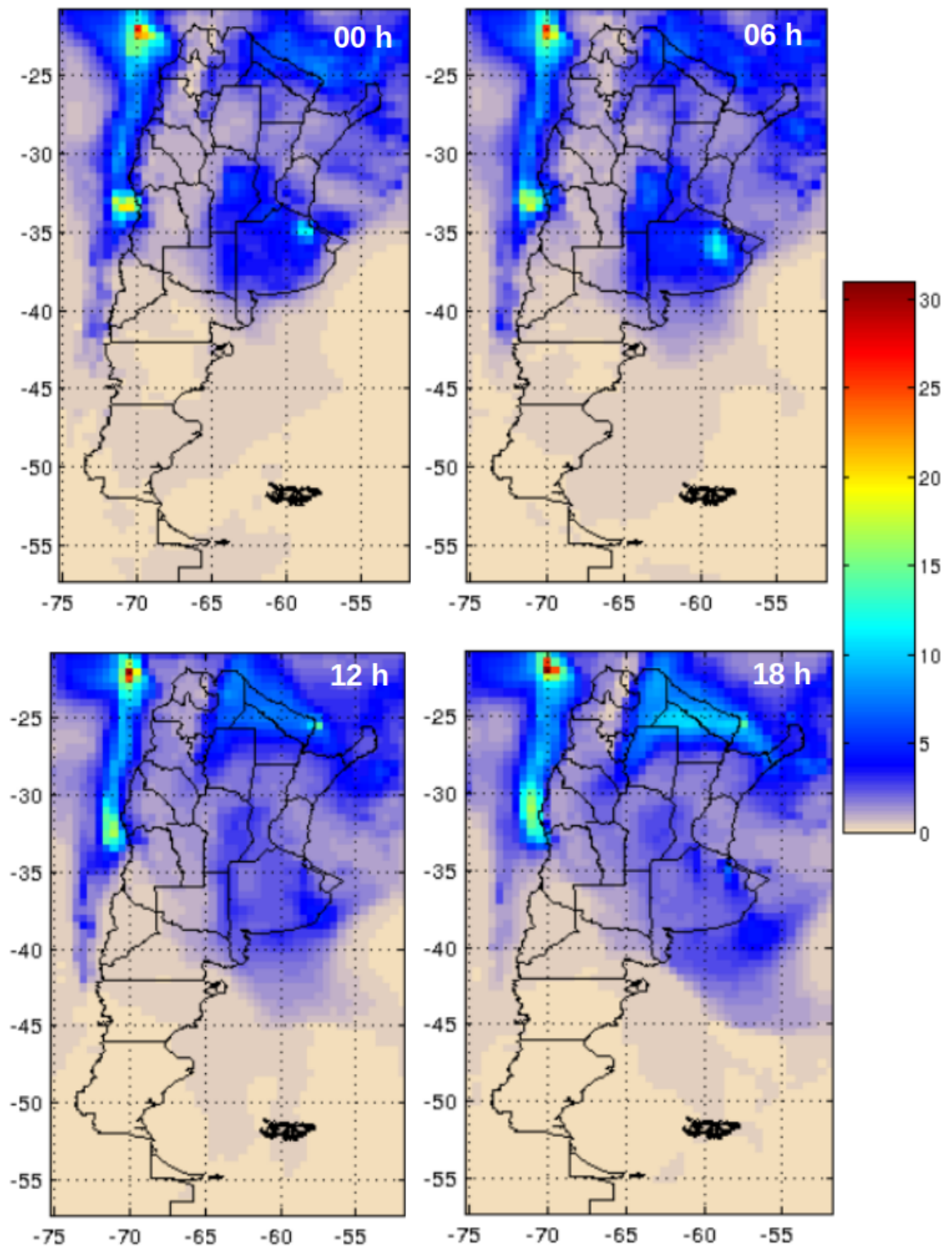


FIGURA 3.8: Mapas de salida de CHIMERE para PM10 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]. Se muestran los resultados simulaciones para el día 19 de marzo de 2009 a las 00, 06, 12 y 18 hs.

3.4 Inventario de Emisiones: EDGAR

3.4.1 Descripción

EDGAR es un inventario de emisiones antropogénicas global. Fue construido por la European Commission, Joint Research Centre (JRC) y Netherlands Environmental Assessment Agency (PBL).

La base de datos geográfica de cada emisión, categorizada por el Panel Intergubernamental del Cambio Climático de las Naciones Unidas en sectores productivos (en adelante “sectores IPCC”, del inglés *Intergovernmental Panel for Climate Change*), se construyó para cada país sobre una grilla espacial de 0.1° de resolución en unidades de Gg/año, para la versión 4.2, utilizada en este trabajo.

Las emisiones fueron calculadas para categorías de fuentes y para cada país por aplicación de una tecnología basada en el cálculo de factores de emisión. Esto significa que para cada sector-país considerado se incluye la combinación de datos para los parámetros de la siguiente ecuación:

$$EM_c(y, x) = \sum_{i,j,k} [AD_{C,i}(y) \bullet TECH_{C,i,j}(y) \bullet EOP_{C,i,j,k}(y) \bullet EF_{C,i,j}(y, x) \bullet (1 - RED_{C,i,j,k}(y, x))] \quad (3.4)$$

Así, las emisiones (EM) por un país c son calculadas para cada compuesto x en una base anual (y) y un sector (i), multiplicando por un lado los datos de actividad específica por país (AD), cuantificando la actividad humana para cada sector i , con la diversidad de j tecnologías ($TECH$) para cada sector i , y con su porcentaje de disminución para una de las k mediciones a la salida de la emisión (EOP) para cada j tecnología, y por otro lado el factor de emisión específico de cada país (EF) para cada sector i y tecnología j con una reducción relativa (RED) de la emisión no controlada por la reducción k .

Estos parámetros se incluyen en los cálculos basados en la evaluación de literatura científica, guías de inventarios, informes de inventarios e industrias y documentación de bases de datos. (Para más detalle, consultar en el sitio de internet de EDGAR: <http://edgar.jrc.ec.europa.eu>)

3.4.1.1 Especies estimadas:

La versión 4.2 de EDGAR estima las emisiones antropogénicas para distintos gases de efecto invernadero; gases precursores de ozono troposférico; gases acidificantes; partículas y aerosoles primarios, y sustancias de agotamiento del ozono estratosférico.

3.4.1.2 Categorías de las emisiones: sectores IPCC

Las fuentes estándares están definidas usando las categorías de fuente de IPCC, desarrolladas por el Programa Nacional de Inventarios de Gases de Invernadero IPCC (*IPCC National Greenhouse Gas Inventories Programme*). El primer número identifica el sector de la fuente principal:

1. Energía (incluyendo la combustión de biocombustible y fugas, venteo y quema de gas).
2. Procesos industriales (sin combustión).
3. Uso de solventes y otros productos.
4. Agricultura (incluyendo incendios de la sabana).
5. Cambios en el uso del suelo y forestación.
6. Residuos.
7. Otras fuentes antropogénicas.

La Organización Mundial de la Salud (2005) menciona que hay diferentes convenciones para subdividir las emisiones de acuerdo a la actividad responsable de ellas.

Un ejemplo es el sistema de sectores SNAP 97 usado en la base de datos CORINAIR de la agencia ambiental europea. Es justamente este sistema el que reconoce CHIMERE para la lectura de datos de emisiones, y a los que deberá convertirse el inventario de emisiones EDGAR para poder aplicar en este trabajo. La división de actividades SNAP junto con la conversión de sectores IPCC a SNAP se presenta posteriormente en el Capítulo 4.

3.4.1.3 Incertezas de EDGAR

Las estimaciones de incertezas de los inventarios de emisiones, difíciles de lograr en el corto plazo, son importantes para las aplicaciones de modelos y políticas de control. Otras versiones de EDGAR, distintas a la 4.2, cuentan con estimaciones de las incertezas. En cambio, para esta versión las incertezas aún están en preparación. (Para acceder a la documentación que describe y cuantifica las incertezas para EDGAR versión 3: <http://themasites.pbl.nl/en/themasites/edgar/documentation/uncertainties/index.html>)

3.4.1.4 Emisiones en el mundo

EDGAR estimó las emisiones antropogénicas globales, como se muestra en la Figura 3.9.

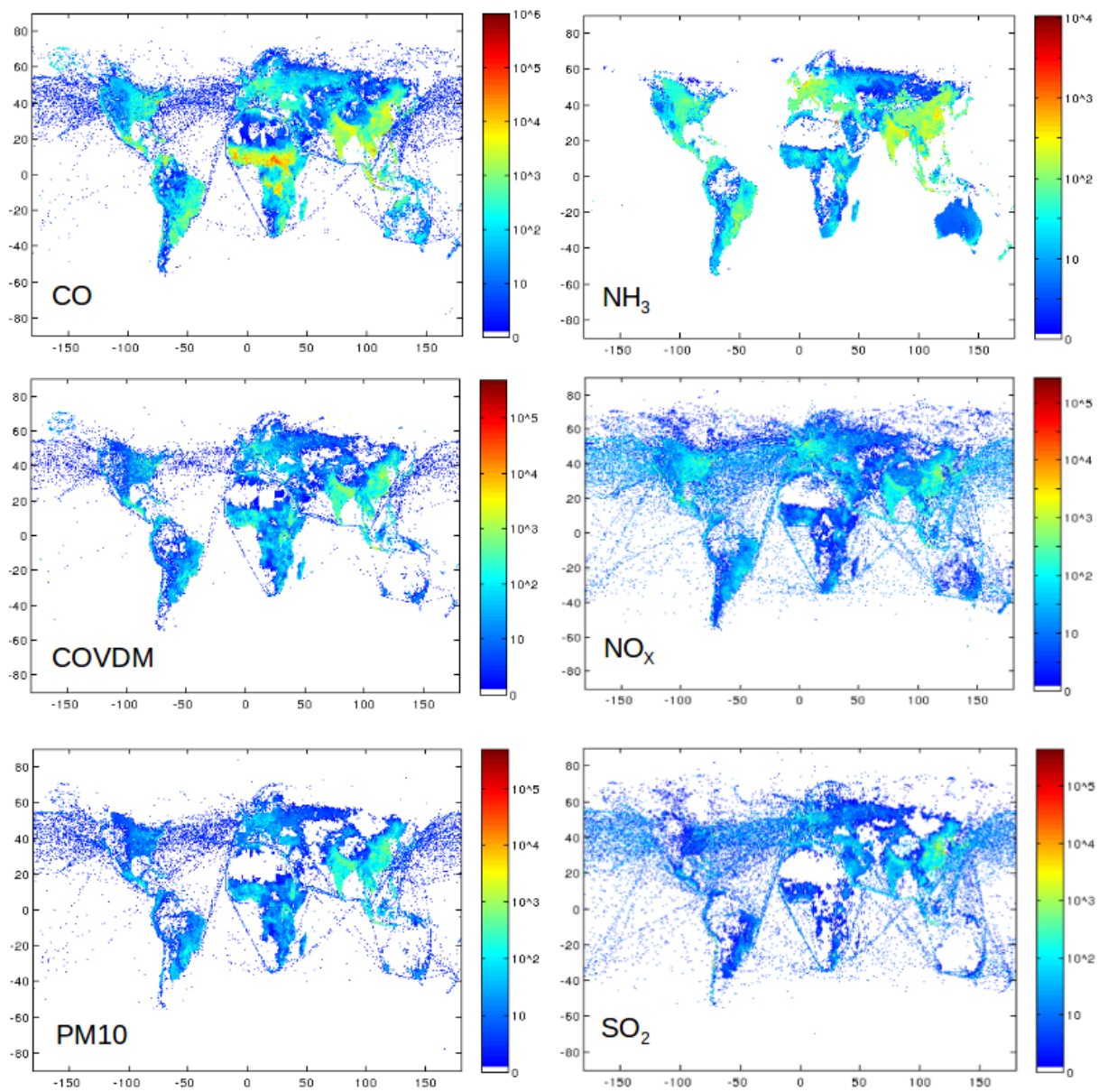


FIGURA 3.9: Logaritmo de estimaciones de emisiones antropogénicas de EDGAR para CO, NH₃, COVDM para sectores residenciales, NO_x, PM₁₀ y SO₂. La unidad en todos los casos es Gg/año.

Capítulo 4

Interfaz CHIMERE-EDGAR

La creación de la interfaz entre el inventario de emisiones antropogénicas EDGAR y el modelo de transporte químico CHIMERE es no sólo imprescindible para la realización de este trabajo, sino que además es muy importante en términos del aporte que realiza a regiones del mundo que aún no han desarrollado inventarios de emisiones antropogénicas específicas. Gracias al desarrollo que aquí se presenta, estas regiones podrán utilizar EDGAR y simular la calidad del aire con CHIMERE para obtener pronósticos o analizar eventos particulares.

Desarrollar la interfaz implica realizar todo lo necesario para que CHIMERE pueda interpretar y alimentarse de la información contenida en la base de datos de EDGAR. Es importante aclarar que esta interfaz se implementa para EDGAR v4.2 y el preprocesador emiSURF2011a distribuido con CHIMERE v2011a+ (será necesario revisar la interfaz en caso de que se utilice un preprocesador distinto). Los productos obtenidos de la interfaz también fueron probados con éxito para CHIMERE v2013b.

4.1 Detalles técnicos de la interfaz

La generación de la primera versión de la interfaz involucró los siguientes pasos:

1. Descarga de datos de EDGAR v4.2 (última versión disponible, del año 2008).

2. Conversión de concentraciones de las emisiones desde sectores productivos IPCC a SNAP.
3. Generación de la grilla de datos.
4. Modificación y uso del código de la interfaz de emisiones emiSURF, provista por la distribución del modelo CHIMERE.

Durante el desarrollo de esta etapa se tuvieron en cuenta los requerimientos de la interfaz emiSURF, que en su ejecución genera los datos de entrada de CHIMERE para que pueda realizar las simulaciones.

4.1.1 Descarga de datos de EDGAR v4.2

Las especies disponibles, en la base de datos EDGAR, para el estudio de la calidad del aire son: CO, NH₃, SO₂, NO_x, PM10 y COVDM (sin diferenciar). También es importante incluir en el inventario de emisiones las especies PM2.5, carbono orgánico (*OC*, por sus siglas en inglés) y carbono negro (*BC*, por sus siglas en inglés), las que aún no están disponibles para esta versión. Una de las proyecciones para el futuro próximo, es la implementación del inventario de emisiones HTAP (<http://www.htap.org>) que considera estas últimas especies con la misma resolución espacial de EDGAR v4.2. Para ello será necesaria una revisión de la interfaz presentada aquí.

La información de emisiones antropogénicas globales se encuentra organizada en distintos archivos:

- **Archivos de emisiones en una grilla:** un archivo por especie y subsector IPCC (muchas veces los archivos contienen integrados datos de emisiones de más de un subsector), con una resolución espacial de $0.1 \times 0.1^\circ$, para el año 2008. Formato ASCII (utilizado en esta interfaz, en unidades de ton/ $0.1 \times 0.1^\circ$ / año) ó NetCDF (en unidades de kg/m²/s)
- **Archivos de resumen por sector:** un archivo por especie con las emisiones del año 2008, por país y subsector IPCC. Formato CSV.

La descarga de archivos puede realizarse desde el sitio en internet del inventario de emisiones: <http://edgar.jrc.ec.europa.eu>

4.1.2 Conversión de concentraciones de las emisiones desde sectores IPCC a SNAP y generación de la grilla de datos

Como fue mencionado en el Capítulo 3, la base de datos EDGAR se expresa en términos de sectores IPCC, por lo que es necesaria su conversión a sectores SNAP para su uso con CHIMERE. Tal conversión fue realizada para todo el mundo, según la Tabla 4.1 (EMEP/CORINAIR, 2000), utilizando la información de Argentina de los archivos de resumen por sector a fin de separar proporcionalmente emisiones de subsectores de actividades que se encontraban integrados en algunos archivos (esto debe ser tenido en cuenta en caso de que quieran usarse los mismos archivos para otro país).

TABLA 4.1: Conversión de sectores IPCC a SNAP.

Sectores IPCC	Descripción	Sectores SNAP
1A1a 1A1bc	Combustión en plantas de energía y transformación	SNAP 1
1A4	Procesos no industriales de combustión (residenciales, comerciales, otros)	SNAP 2
1A2	Combustión en industrias manufactureras	SNAP 3
2A1 2A2 2A7 2B 2C 2D 2E	Procesos productivos	SNAP 4
1B1 1B2 7A 7B 7C 7D	Extracción y distribución de combustibles fósiles y energía geotérmica	SNAP 5
2F1 2F2 2F3 2F4 2F5 2G 3A 3B 3C 3D	Uso de solventes y otros productos	SNAP 6
1A3b	Tránsito vehicular	SNAP 7
1A3a 1A3c 1A3d 1A3e	Otras fuentes móviles y maquinarias	SNAP 8
6A 6B 6C 6D	Tratamiento y destino final de residuos	SNAP 9
4A 4B 4C 4D1 4D2 4D3 4D4 4F 5D	Agricultura	SNAP 10
-	Emisiones Biogénicas	SNAP 11

Todos los archivos descargados de EDGAR, convertidos a sectores SNAP, se fusionan en un gran archivo por cada contaminante, como se ve en la Figura 4.1. Para la conversión y fusión de datos de cada especie, se escribieron los códigos necesarios para Matlab R2008b disponibles en el Apéndice A)

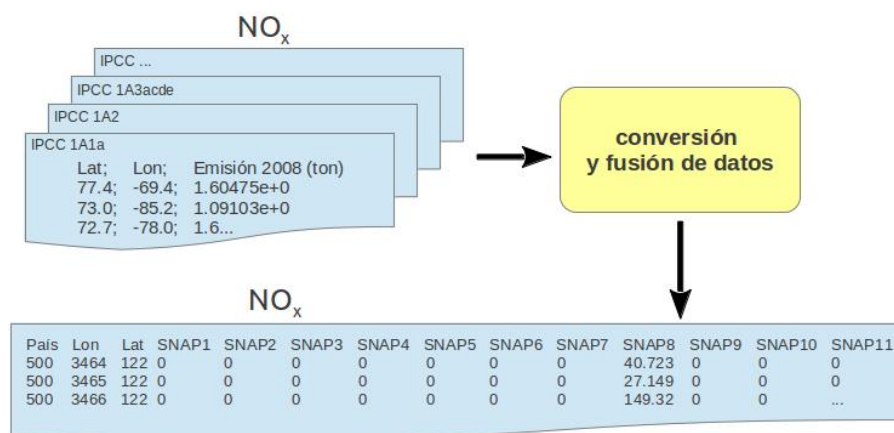


FIGURA 4.1: Ejemplo de conversión de archivos para NO_x y sector IPCC a SNAP y fusión de sectores.

Los nuevos archivos, con información de emisiones globales, se ubicaron en `/home/CHIMERE/emi2011a/emiSURF2011a/annual-EDGAR01x01`.

4.1.3 Modificación y uso del código de la interfaz de emisiones emiSURF

El programa emiSURFv2011a es una interfaz de emisiones que utiliza inventarios de emisiones antropogénicas (EMEP <http://www.emep.int/>, configuración por defecto), con un dominio espacial centrado en el continente europeo. Genera los archivos de emisiones con la estructura necesaria para que después puedan ser utilizados por CHIMERE, interpolando los datos de emisiones a la grilla de CHIMERE horizontal y verticalmente, desagregando los COVs y NO_x en compuestos reales utilizando un perfil de especiación (IER - Universidad de Stuttgart), y distribuyendo las emisiones anuales de cada especie, por sector SNAP a formas temporales mensuales, diarias e incluso horarias.

En este trabajo se modificó el código de emiSURF, de modo que ahora será posible el uso del inventario de emisiones antropogénicas EDGAR para generar los archivos mencionados, recortados para el dominio definido por el usuario en `domainlist.nml` o en un nuevo archivo `COORD`.

El nuevo programa `emis-surf.sh`, ubicado en `/home/CHIMERE/emi2011a/emiSURF2011a`,

tiene un encabezamiento donde el usuario debe definir sus variables, como se muestra a continuación:

```

#/bin/sh
unset LANG

# outype=0 one file per month, outype=1, one file per month and per species
outype=1
# Digit number for shipping emissions (default=2;3 could be available, check before!!)
shipping=2
# Output species, outputspecies=metals, nometals
outputspecies=nometals

# pdir is the current directory (enter manually the complete path)
export pdir='pwd'
# where is the chimere model? (we need its makefiles)
export chimeredir=/home/CHIMERE/chimere2011a+
# where do you take land use (netcdf) files ?
export bigfiles=/home/bigfiles/LANDUSE
# what is your chimere domain for these emissions?
export dom=ARG
# Years to simulate
listyears="2013"
# where do you want the results
export outdir=${bigfiles}/EMI
# possible sources: LA (free), EMEP (free), TNO (not free, not provided)
# Added EDGAR (gc, 12/2/13)
#list_sources="LA EMEP05x05" inventario de emisiones antropogenicas por default
list_sources="EDGAR01x01"
# Reggridding landuse : possible Land Use sources: glcf or globcover
lu_source="glcf"

#=====
# end of user options
#=====

```

Antes de ejecutar el programa emiSURF, fue necesario generar el archivo SPECIES_EDGAR01x01.data con el listado de especies que brinda EDGAR (CO, NH₃, SO₂, NO_x, PM10 y COVDM) y ubicarlo en el directorio ./inputdata. También se anuló la línea 156 del código ./src/sectoremis_onespec.F90 de modo que ahora no se consideran cambios en la hora local a lo largo del año.

Los cambios para lograr que `emis-surf.sh` pueda leer la base de datos de EDGAR, generada como se explica en la subsección anterior, son:

- lectura de los datos de EDGAR desde `./inputdata/SPECIES_EDGAR01x01.data`,
- recorte de emisiones globales para el dominio de salida deseado. Este fue un paso necesario para acelerar el proceso de interpolación. El dominio se define en el archivo `/home/CHIMERE/chimere2011a+/domains/domainlist.nml`:

```
domain  NX  NY  DX  DY  XMIN  YMIN
ARG      47  73  0.5  0.5 -75.0 -57.0
```

- creación de archivos de emisiones antropogénicas, para el dominio elegido, con perfil temporal horario, diario y mensual, en la variable `outdir` ya declarada.

El código completo del nuevo `emis-surf.sh` se encuentra en el Apéndice B de esta Tesis.

El código `emis-surf.sh` se ejecuta desde el directorio `/home/CHIMERE/emi2011a/emiSURF2011a`:

```
./emis-surf.sh
```

De este modo, se genera el nuevo conjunto de archivos en el directorio asignado por el usuario en el encabezamiento del `emis-surf.sh` en la variable `outdir`.

Finalmente, los archivos resultantes `EMIS.<dominio>.<mes>.<especie>.s.nc` contienen las emisiones para las especies del modelo, especificadas en el archivo `ACTIVE_SPECIES`, con perfiles horarios definidos según los aportes de cada sector de actividad SNAP, para una grilla de resolución horizontal de $0.1 \times 0.1^\circ$.

4.2 Total de emisiones en Argentina

En la Figura 4.2 se muestran las emisiones totales de cada especie utilizada de la base de datos EDGAR v4.2.

También es posible observar cuánto aportan los distintos sectores productivos a las emisiones antropogénicas, según las estimaciones del inventario de emisiones EDGAR. En la Figura 4.3 se muestran las distintas contribuciones a cada contaminante, clasificadas según los sectores SNAP, para Argentina. La información de la cantidad emitida, estimada por EDGAR, también se muestra en la Tabla 4.2, desglosada en sector IPCC para cada contaminante.

Para NO_x , el mayor aporte se recibe del transporte vehicular, seguido de la agricultura. Más del 50 % del SO_2 proviene de la quema de combustibles fósiles en plantas de energía. La agricultura aporta principalmente a las emisiones de CO y NH_3 en un 50 y 100 % respectivamente; además, el 30 % de las emisiones de CO son del sector automotor. Para los COVDM, los principales contribuyentes son el transporte vehicular, la producción y uso de solventes, la extracción y distribución de combustibles fósiles y la agricultura.

TABLA 4.2: Aportes de cada sector productivo a las emisiones calculadas por el Inventario EDGAR v4.2 [Gg/año]

Sectores SNAP	NO_x	COVDM	SO_2	NH_3	CO	PM10
1	282.766,60	5.043,83	534.112,80	31.481,64	373.453,00	160.656,40
2	58.440,20	305.455,70	49.080,02	352,85	1.284.656,00	176.538,50
3	146.653,40	62.190,65	208.621,40	4.427,38	364.851,80	50.270,39
4	6.138,69	28.531,26	865.888,50	1.556,98	389.110,30	28.836,65
5	663,85	441.904,90	5,52	0,00	379.526,70	799,93
6	0,00	379.624,00	0,00	0,00	0,00	58,91
7	551.784,30	514.315,30	21.988,18	3.822,64	3.673.924,00	17.876,77
8	212.181,30	6.703,64	119.855,80	0,00	46.826,53,00	17.581,23
9	24,96	40.745,25	3.72×10^{-12}	0,00	0,00	189,99
10	296.868,00	322.771,80	29.011,06	1.339.410,00	8.097.012,00	631.102,50
total	1.555.521	2.107.287	1.828.563	1.381.051	14.609.360	1.083.911

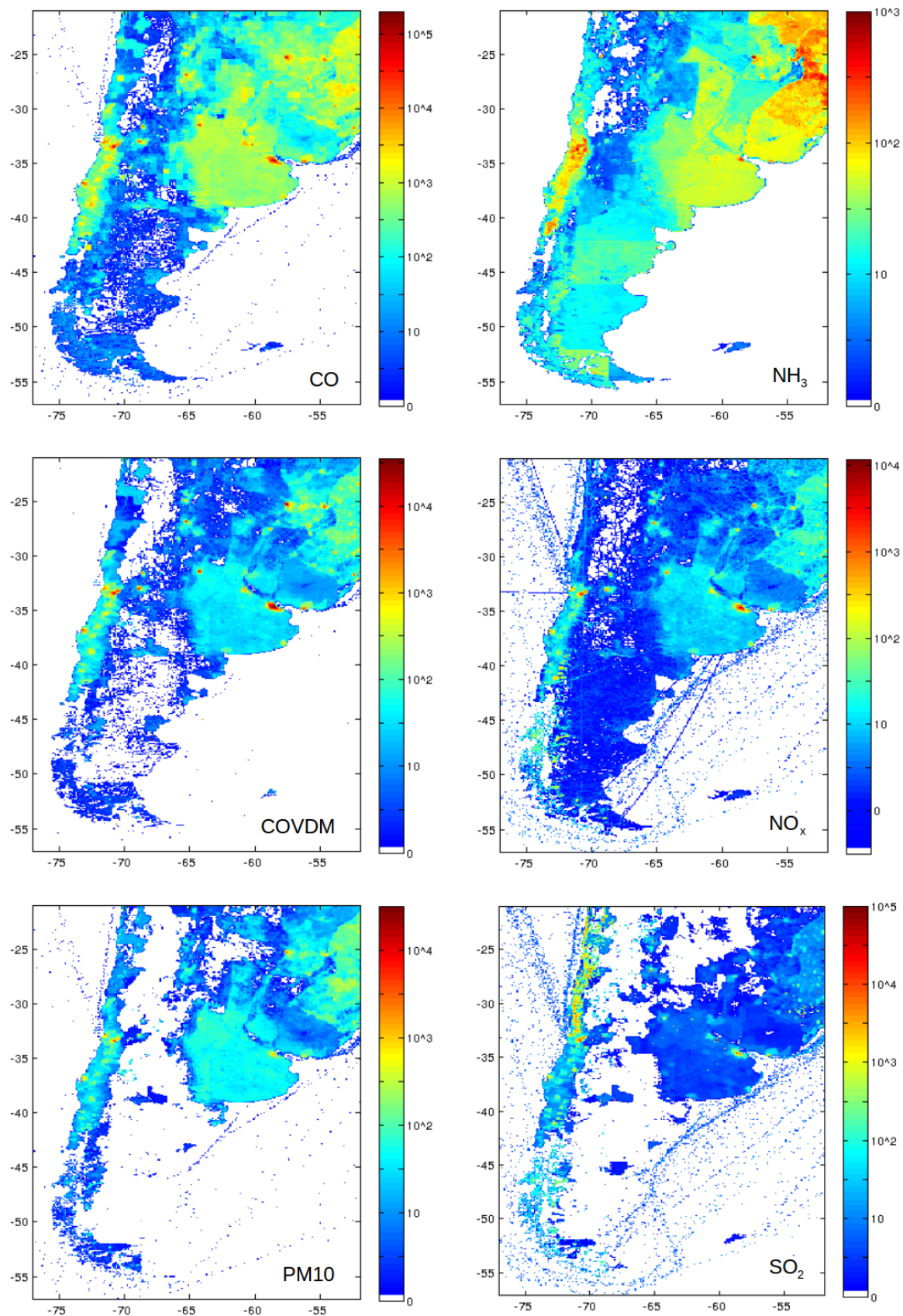


FIGURA 4.2: Logaritmo de estimaciones de emisiones antropogénicas de EDGAR para CO, NH₃, COVDM para sectores residenciales, NO_x, PM10 y SO₂. La unidad en todos los casos es Gg/año.

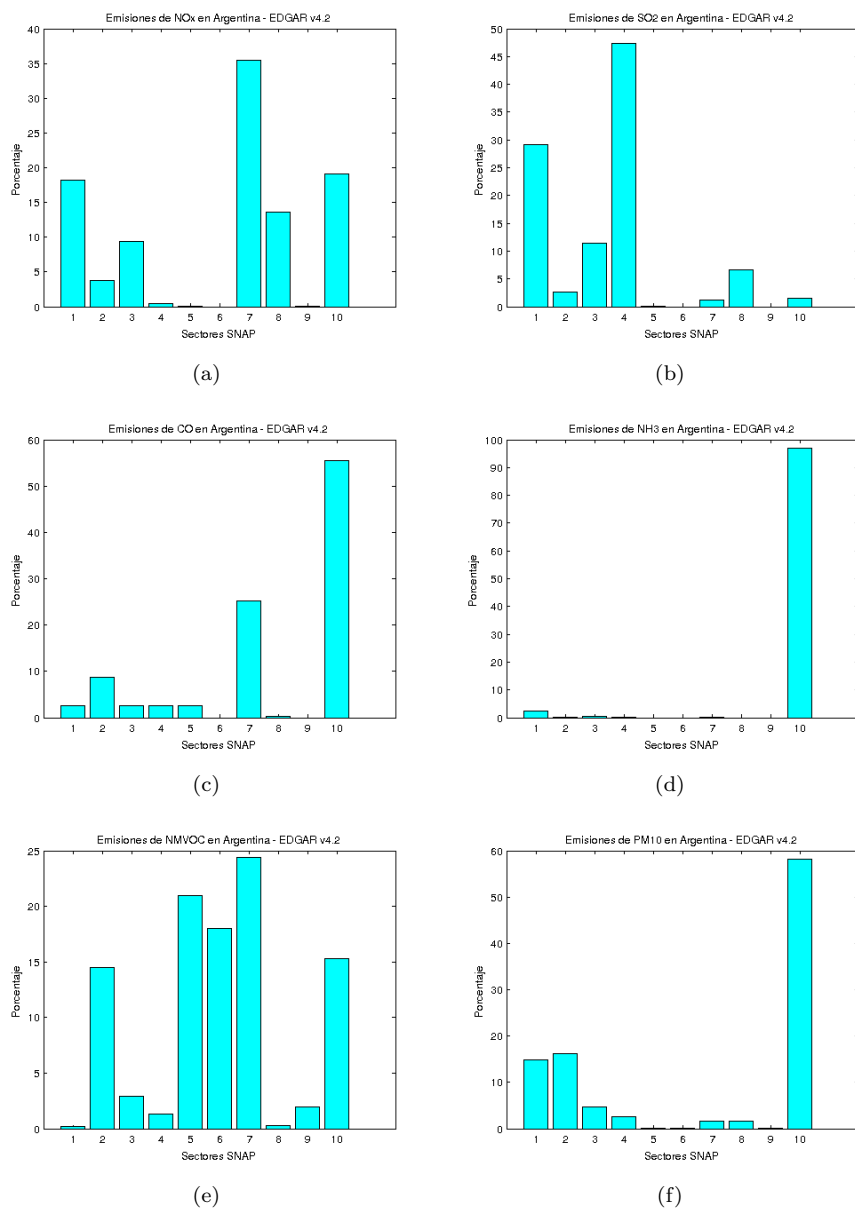


FIGURA 4.3: Contribuciones de los sectores productivos SNAP a emisiones en Argentina, según estimaciones del inventario de emisiones EDGAR v4.2, de a) NO_x; b) SO₂; c) CO; d) NH₃; e) COVDM (sin especiar) y f) PM₁₀.

4.2.1 Comparación de estimaciones EDGAR con las del inventario argentino

Como fue mencionado en el Capítulo 2, la Fundación Bariloche realizó junto a la Secretaría de Ambiente de la Nación, el Inventario de Gases de Efecto Invernadero de la República Argentina, para el año 2000. Dicho inventario fue realizado para analizar la evolución del sector energético a partir de información de los Balances Energéticos

Nacionales que elaboró la Secretaría de Energía de la Nación.

En su elaboración, se utilizó el método de referencia sugerido en las Guías Revisadas 1996 del IPCC para la Elaboración de Inventarios Nacionales de Gases de Efecto Invernadero.

Es necesario recordar que este inventario presenta los totales nacionales de las cantidades emitidas por año, en unidades de giga-gramos (Gg/año), pero estos datos no tienen una distribución espacial.

En la comparación de las estimaciones de emisiones de Argentina con las de EDGAR, se tienen en cuenta las cantidades informadas en el sector 1 IPCC, correspondiente al sector energético. En la Tabla 4.3 se pueden observar valores para ambos inventarios. El sector correspondiente a la “Quema de combustibles fósiles” (o sector IPCC 1A) incluye fuentes fijas como: industrias de la energía, manufactureras, emisiones residenciales, comerciales, del sector público y agropecuario; y fuentes móviles: transporte carretero, de cargas, aéreo, ferrocarril y navegación. Las “Emisiones fugitivas” (sector IPCC 1B) se deben a los procesos productivos alrededor de la obtención de carbón mineral, petróleo y gas natural. El tercer sector se refiere a “Emisiones de transporte internacional” (sector IPCC 1C) que son causadas por el transporte aéreo y marítimo.

Las mayores diferencias se observan en las emisiones fugitivas, donde para NO_x y CO el inventario argentino estima valores de aproximadamente 4 veces los de EDGAR, en cambio EDGAR sobreestima las emisiones de COVDM para el mismo sector 100 veces más a las calculadas en Argentina. Por otro lado, EDGAR considera que el SO_2 no hace ningún aporte a las emisiones fugitivas.

EDGAR, además, no valora como aportes a las emisiones por el transporte internacional de aviones o flotas marinas individualizados en el sector IPCC 1C, aunque estas emisiones pueden estar distribuidas en distintos sectores.

La tasa ARG/EDGAR muestra que la mayor diferencia está en las estimaciones de COVDM, donde Argentina estima sus emisiones 6 veces más de lo que hace el inventario EDGAR.

TABLA 4.3: Comparación de estimaciones de los inventarios argentino y EDGAR v4.2
[Gg/año]

Inventario	Especie	Quema de combustibles fósiles IPCC 1A	Emisiones fugitivas IPCC 1B	Transporte internacional IPCC 1C	Total
ARG* (2000)	NO _x	649.13	2.04	51.35	702.52
	CO	2624.41	434.50	9.80	3068.71
	COVDM	328.09	21.20	4.22	353.51
	SO ₂	64.07	15.30	4.77	84.14
EDGAR (2008)	NO _x	537.81	0.47	0.00	538.28
	CO	2479.01	113.63	0.00	2592.65
	COVDM	347.20	223.18	0.00	57.37
	SO ₂	262.48	0.00	0.00	262.49
ARG*/ EDGAR	NO _x	1.21	4.34	-	1.31
	CO	1.06	3.82	-	1.18
	COVDM	0.95	0.10	-	6.16
	SO ₂	0.24	-	-	0.32

* ARG se refiere al Inventario de Emisiones estimado por la Fundación Bariloche.

Los resultados presentados en esta sección indican la necesidad de revisar la base de datos de emisiones para el país. Si bien EDGAR tiene una distribución espacial necesaria para la realización de simulaciones de la calidad del aire, estas emisiones no pueden considerarse definitivas. Es importante que Argentina tome la decisión de abocarse a la generación de un inventario actualizado y georreferenciado, que considere además otras especies con efectos sobre la salud de la población y otros sectores productivos.

Capítulo 5

Evaluación del sistema de modelado

A partir de este trabajo el sistema de modelado descrito en el Capítulo 3 puede utilizarse para la descripción y/o pronóstico operativo de la calidad del aire y el desarrollo e implementación de regulaciones para el control de la contaminación atmosférica sobre el territorio nacional. Por esta razón, y por realizar este trabajo la primera utilización del sistema de modelado sobre Argentina, su evaluación es un requisito necesario para conocer el grado con el que puede simular características espacio-temporales de la calidad del aire.

5.1 Descripción de índices estadísticos

Dennis et al. (2010) explica que la elección del criterio de evaluación de modelos depende del contexto en el que este modelo se aplicará, por ejemplo, para la aplicación de controles son importantes las estimaciones adecuadas de concentraciones como respuesta a las emisiones y las condiciones meteorológicas; en cambio, un modelo de predicción es evaluado solamente en su capacidad de simular la evolución temporal de algunas variables elegidas.

La evaluación de modelos es un procedimiento complejo en general (Chang y Hanna, 2004) que involucra distintos pasos (evaluación científica, verificación del código, validación del modelo, sensibilidad del análisis, etc.). Los modelos aplicados para la evaluación de la calidad del aire son comúnmente evaluados generando estadísticas de las desviaciones entre las estimaciones del modelo y las observaciones; a la vez que se comparan sus magnitudes con algún índice estadístico elegido. Esta metodología fue denominada por Dennis et al. (2010) como *evaluación operacional*, o análisis del desempeño estadístico. Aunque la comparación entre concentraciones modeladas y observadas no provee una mirada profunda dentro de las propiedades del sistema de modelado, es una primera aproximación a la evaluación del desempeño del modelo (Derwent et al., 2010, Irwin et al., 2008).

Para realizar un análisis del desempeño estadístico se pueden encontrar numerosos índices propuestos para distintas aplicaciones. Thunis et al. (2012) recomienda aplicar múltiples indicadores ya que cada uno posee ventajas y desventajas. Los más utilizados son el error cuadrático medio (ECM, en inglés RMSE, *root mean square error*), el coeficiente de correlación de Pearson, la desviación estándar, el sesgo y el sesgo medio normalizado (SMN) (Thunis et al., 2012; Dennis et al., 2010).

En este trabajo se utilizan los siguientes índices:

Sesgo:

$$Sesgo = \bar{M} - \bar{O} \quad (5.1)$$

SMN: sesgo medio normalizado

$$SMN(\%) = \frac{Sesgo}{\bar{O}} \times 100 \quad (5.2)$$

ECM: error cuadrado cuadrático medio (o RMSE)

$$ECM = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - M_i)^2} \quad (5.3)$$

ρ : coeficiente de correlación de Pearson

$$\rho_{X,Y} = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y} \quad (5.4)$$

r : estadístico muestral de correlación

$$r_{xy} = \frac{\sum x_i y_i - n \bar{x} \bar{y}}{n s_x s_y} \quad (5.5)$$

donde O se refiere a las observaciones o mediciones de campo, M a los resultados de las simulaciones, i al paso del tiempo, N a los intervalos de tiempo, σ_{XY} a la covarianza de (X,Y) , σ_X y σ_Y : a la desviación típica de X e Y respectivamente.

Es necesario tener en cuenta que estos índices estadísticos no consideran que las predicciones de modelos regionales de tres dimensiones son conjuntos de datos promediados en un volumen (representando promedios de condiciones meteorológicas, procesos físicos y tasas de reacciones químicas), mientras que las obsevaciones reflejan eventos individuales porque se obtienen de mediciones puntuales. Esta inconsistencia en la evaluación se denomina como el problema de la *inconmensurabilidad* (Dennis et al., 2010) y no puede ser resuelta en este trabajo debido a la falta de mediciones en el dominio espacial y temporal elegidos.

5.2 Pautas generales de la evaluación

En general, se utilizaron las mismas pautas para realizar la evaluación de los modelos meteorológico (WRF) y de transporte químico (CHIMERE), con respecto a la resolución espacial y temporal. Las emisiones que describe la base de datos EDGAR quedan implícitas en los resultados de las estimaciones del último modelo.

Interpolación lineal: Fue necesario realizar una interpolación lineal 2-D de las variables estimadas, debido a que las salidas de los modelos WRF y CHIMERE tienen diferencias en el tamaño y forma de las celdas que componen la grilla de datos, además, los datos de mediciones de campo de las variables que se evalúan son puntuales y tienen coordenadas específicas. También se utilizó esta interpolación para encontrar los valores de emisiones estimadas por EDGAR para los tres sitios de monitoreo continuo.

Nivel vertical: En ambas evaluaciones se tuvieron en cuenta las simulaciones para el nivel más bajo de la atmósfera, incluidas dentro de la capa límite atmosférica, no sólo por ser el nivel más cercano a las estaciones de monitoreo sino por ser el de mayor impacto sobre la calidad del aire que respiramos. En el caso de la evaluación del modelo meteorológico, se utilizaron las variables de temperatura a 2 metros de altura de la superficie y vectores de viento a 10 metros, correspondientes con la medición de esos parámetros, por las estaciones meteorológicas del Servicio Meteorológico Nacional.

Período temporal: Tal como se mencionó en el Capítulo 2, el período temporal simulado se correspondió con la disponibilidad de datos de campo obtenidos para la evaluación del trabajo, aunque debería realizarse para todo un año a fin de analizar también tendencias estacionales de las distintas variables. Una comparación gráfica de todo el período de tiempo se muestra de la Figura 5.1 a la 5.8. A los fines de la evaluación de la reproducción del ciclo diario de concentraciones de contaminantes, se quitaron los datos de los días sábados y domingos tanto de las observaciones como de las simulaciones, ya que tienen otra dinámica temporal por las actividades que se desarrollan en los polos urbanos (Figuras 5.4 y 5.9).

5.3 Evaluación del modelo meteorológico WRF

La evaluación operacional de este modelo implicó contrastar los resultados de las simulaciones con las mediciones de estaciones meteorológicas, provistas por el SMN (Servicio Meteorológico Nacional). Se utilizaron los siguientes parámetros con gran influencia sobre el transporte de contaminantes químicos en la atmósfera:

- dirección del viento a 10 metros de altura de la superficie;

- velocidad del viento a 10 metros de altura de la superficie;
- temperatura a 2 metros de altura de la superficie;
- presión.

Tal como se mencionó en el Capítulo 2, la evaluación se realiza sobre las ciudades de Buenos Aires, Córdoba y Bahía Blanca, donde en cada caso las estaciones meteorológicas se encuentran en los aeropuertos. Las Figuras 5.1, 5.2 y 5.3 muestran tanto la información obtenida por el SMN como de las simulaciones de WRF, para todo el período simulado. Ambos datos tienen una frecuencia horaria, aunque el SMN calcula la media horaria de cada parámetro.

A simple vista, se puede observar que el modelo estima con precisión los parámetros temperatura y presión para los tres sitios. La estimación de la velocidad del viento también sigue una tendencia similar a la medida por las estaciones meteorológicas. La diferencia entre los resultados de WRF y las mediciones de presión en Córdoba y Bahía Blanca puede deberse a una mala calidad del campo de topografía que utiliza el modelo, entonces la superficie de presión se calcula a una altura diferente (10 hPa se corresponde con 100 m de altura, según la ecuación hidrostática). En cambio, es difícil con este tipo de gráficos ser concluyente sobre el desempeño de WRF sobre la dirección del viento.

El segundo análisis, también gráfico, sobre las variables meteorológicas implica la evaluación del desempeño del modelo meteorológico con respecto a los ciclos diarios de dichas variables, que tienen perfiles horarios característicos de cada lugar. Para el caso, se calcularon las medias y desvíos estándares para cada hora del día, a partir del conjunto de datos del SMN y WRF de los tres sitios, tal como se muestra en la Figura 5.4.

Puede observarse que, en general las variables meteorológicas simuladas hacen un buen seguimiento de los perfiles horarios de las variables analizadas, salvo para la presión que es subestimada sistemáticamente en el caso de Córdoba y sobrestimada en Bahía Blanca.

También se evaluaron índices estadísticos de cada variable meteorológica, como se indica en la Tabla 5.1. Todos los índices muestran que las mejores estimaciones son para la temperatura y la presión en todos los casos aunque las mayores diferencias se ven en Córdoba debido a que la temperatura es subestimada por 2° C y la presión por 10 hPa. En el caso del viento, se puede observar un buen desempeño en la velocidad; el modelo estima de mejor forma estas variables en Buenos Aires y Córdoba, según los resultados del sesgo, SMN y ECM. Es posible advertir, a partir de los resultados del sesgo y de las comparaciones gráficas presentadas, que WRF tiene una tendencia a subestimar las variables meteorológicas evaluadas, salvo la presión en Bahía Blanca.

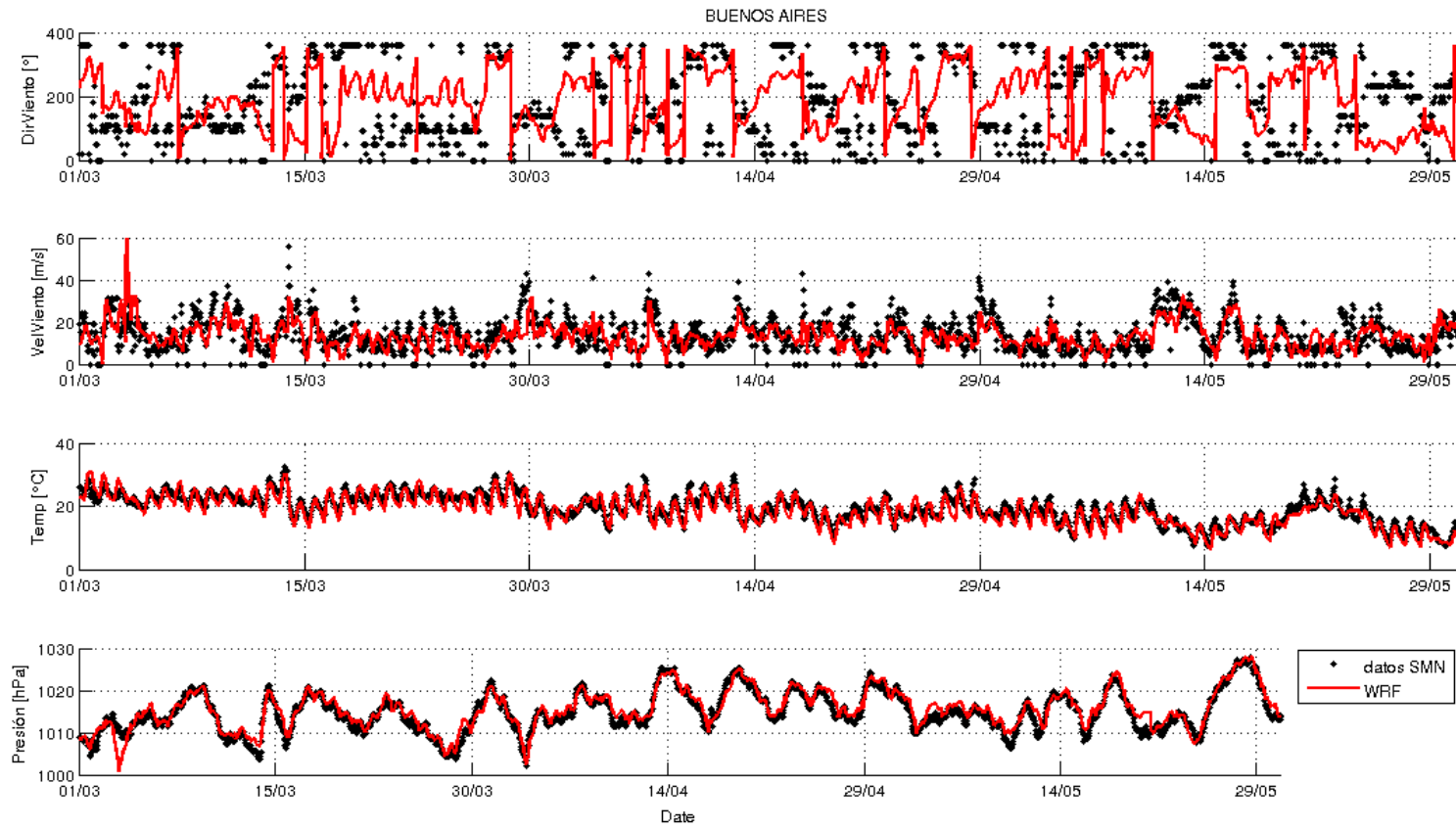


FIGURA 5.1: Simulaciones vs. mediciones meteorológicas en todo el periodo de tiempo de simulación para Buenos Aires.

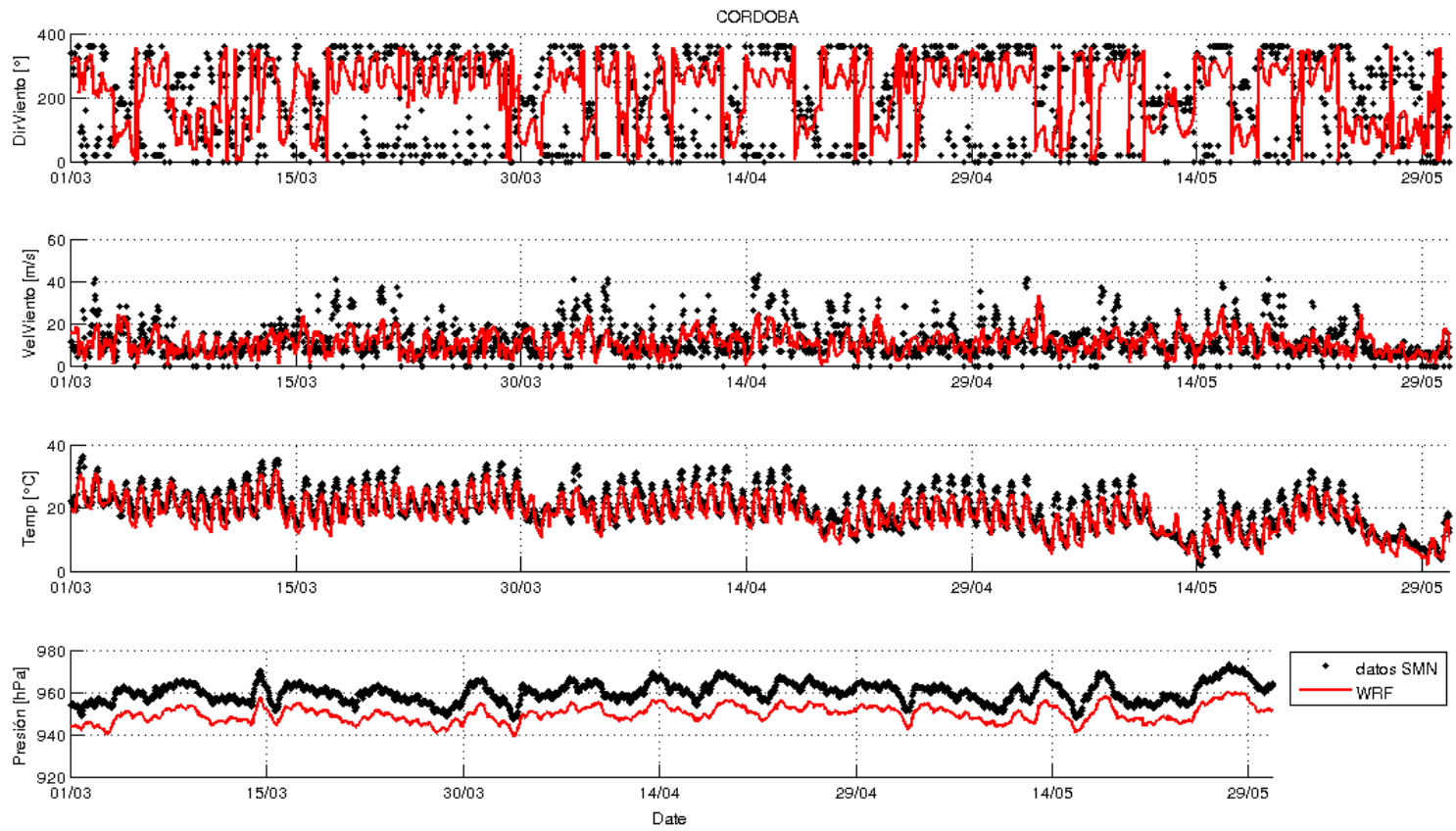


FIGURA 5.2: Simulaciones *vs.* mediciones meteorológicas en todo el periodo de tiempo de simulación para Córdoba.

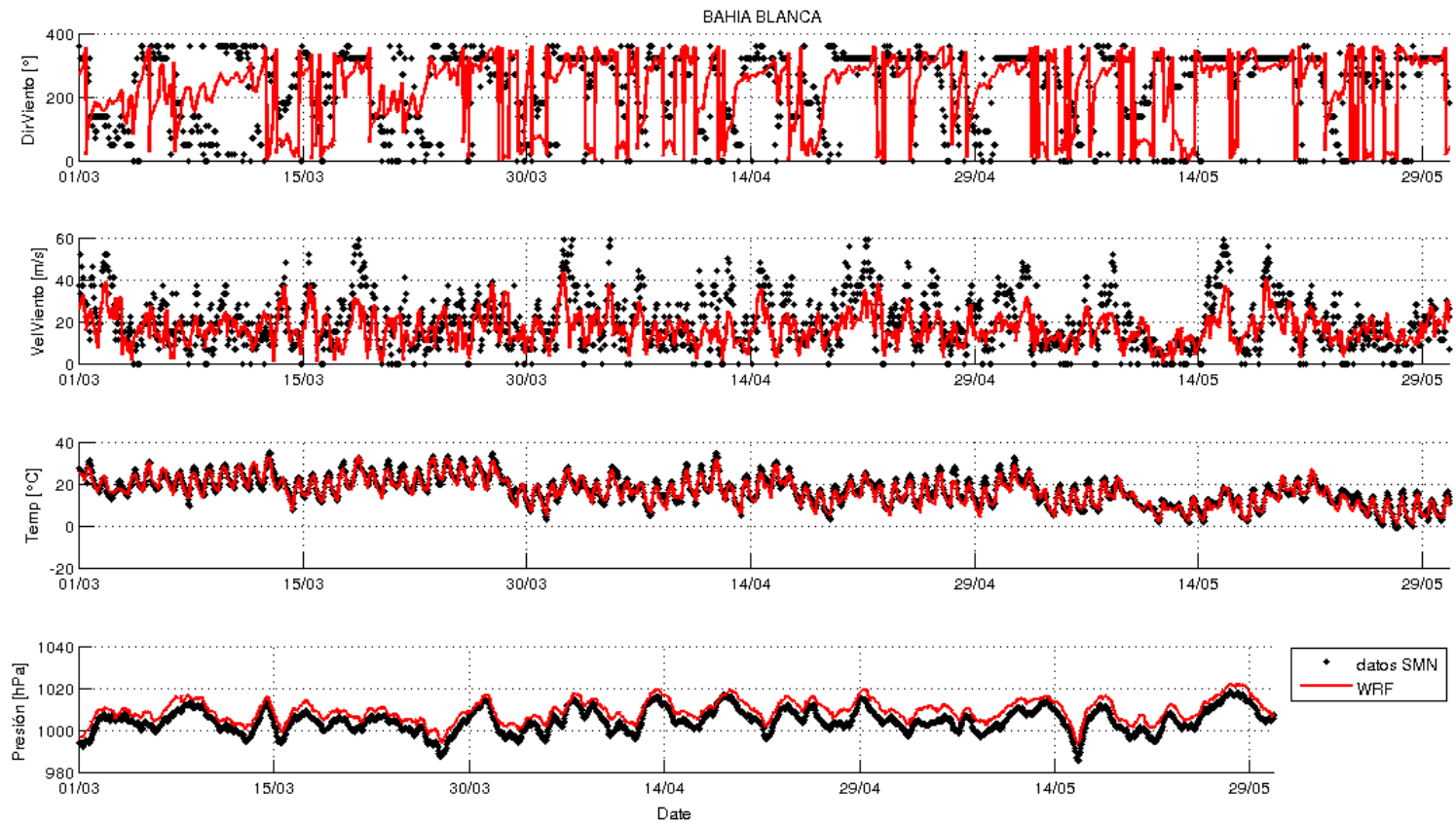


FIGURA 5.3: Simulaciones *vs.* mediciones meteorológicas en todo el periodo de tiempo de simulación para Bahía Blanca.

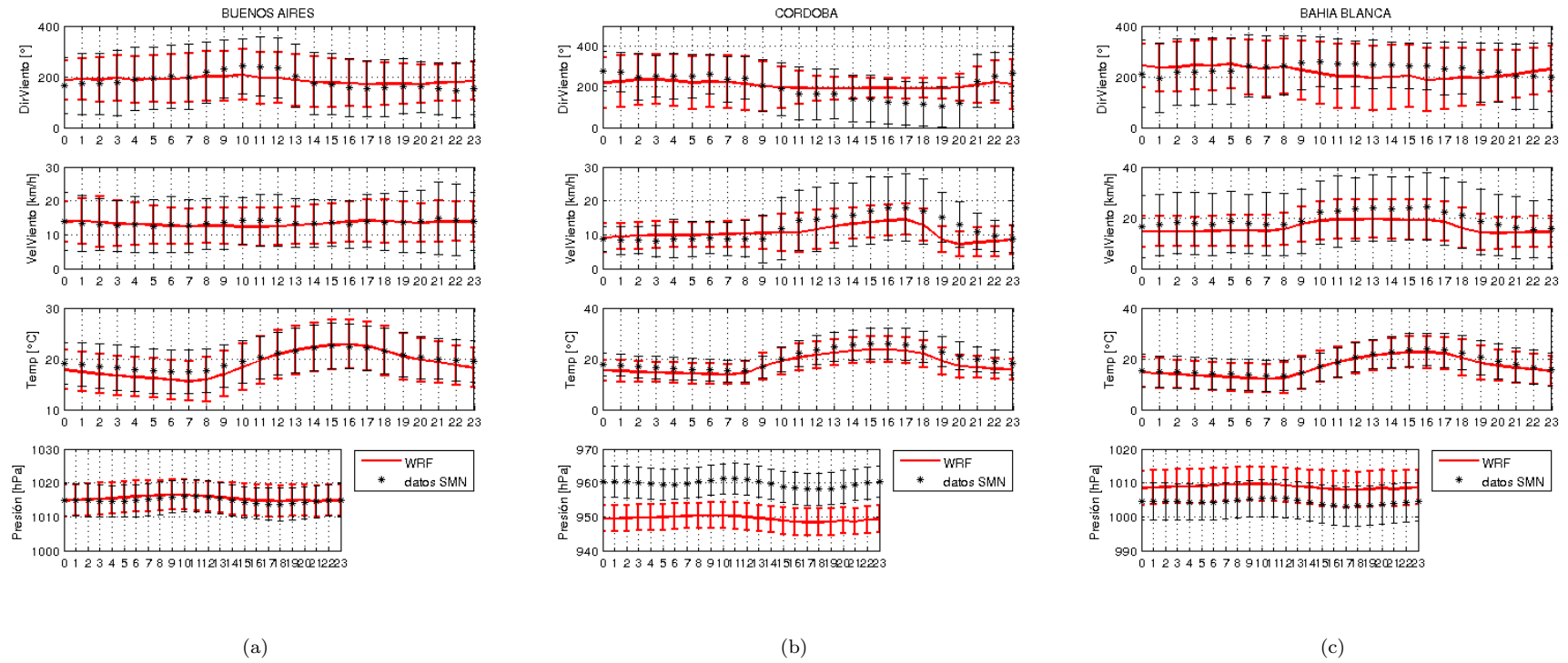


FIGURA 5.4: Variaciones diarias de simulaciones y datos meteorológicos para Buenos Aires, Córdoba y Bahía Blanca, respectivamente.

TABLA 5.1: Índices estadísticos de evaluación de algunas variables meteorológicas simuladas.

Sitio	Índice (°)	Velocidad del viento (km/h)	Temperatura (° C)	Presión (hPa)
Buenos Aires	sesgo	-0.30	-0.84	0.52
	SMN (%)	-2.21	-4.24	0.05
	ECM	6.72	1.97	1.57
	r	0.58	0.93	0.95
Córdoba	sesgo	-1.39	-2.10	-10.35
	SMN (%)	-11.64	-10.46	-1.08
	ECM	7.11	3.22	10.47
	r	0.49	0.92	0.94
Bahía Blanca	sesgo	-3.14	-0.91	4.45
	SMN (%)	-16.15	-5.16	0.44
	ECM	10.38	2.29	4.69
	r	0.63	0.96	0.96

5.4 Emisiones EDGAR

Antes de analizar los resultados de las simulaciones de CHIMERE, es necesario observar las emisiones obtenidas por el inventario EDGAR, que fueron posteriormente procesadas por el programa emiSURF de CHIMERE. En la Figura 5.5 se muestran las emisiones de las especies NO, NO₂, SO₂, CO y PM₁₀, distribuidas con una frecuencia horaria para un día hábil, correspondientes a los sitios de monitoreo de Buenos Aires, Córdoba y Bahía Blanca. Esta distribución temporal fue realizada por el programa emiSURF, utilizando sus perfiles horarios por defecto (con características de dinámicas horarias europeas).

A partir de la figura, es posible deducir que:

- las emisiones estimadas de Córdoba y Bahía Blanca son mucho menores a las de Buenos Aires, salvo las de PM₁₀ donde sus valores son prácticamente del mismo orden;
- los perfiles horarios de Buenos Aires, de todas las especies, se corresponden con el tránsito vehicular y muestran dos horarios con emisiones más altas.

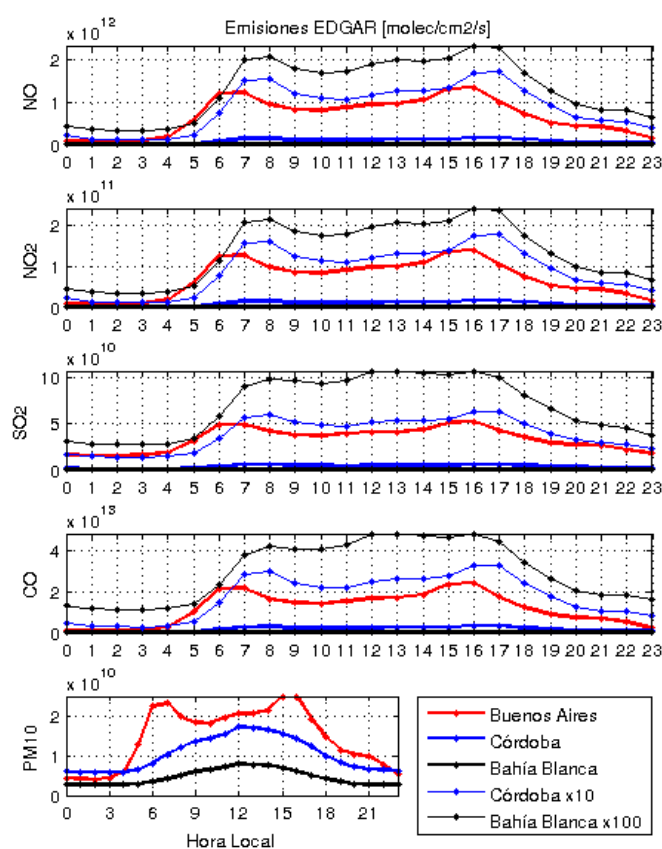


FIGURA 5.5: Emisiones EDGAR de las especies NO, NO₂, SO₂, CO y PM₁₀, con distribución temporal diaria, para las coordenadas correspondientes a las estaciones de monitoreo de Buenos Aires, Córdoba y Bahía Blanca. Para una mejor visualización del perfil horario de las emisiones, las correspondientes a Córdoba y Bahía Blanca fueron multiplicadas por factores de 10 y 100 respectivamente, salvo para el caso del PM₁₀.

- los perfiles horarios de Córdoba, al igual que los de Buenos Aires, se corresponden con el tránsito vehicular, salvo en el caso de las emisiones de PM₁₀, que pueden tener una proveniencia diferente según EDGAR;
- los perfiles horarios de Bahía Blanca siguen a las emisiones vehiculares en los casos de NO y NO₂. Las de SO₂, CO y PM₁₀ pueden estar influenciadas en gran parte por actividades de otros sectores con emisiones de características discontinuas (en la noche estas emisiones disminuyen considerablemente).

A partir de estos gráficos y su contrastación con los de frecuencia vehicular en Buenos Aires y Córdoba (Figuras 2.3 y 2.4) ya se pueden dilucidar diferencias en cuanto a los perfiles horarios: no sólo la circulación vehicular tiene su máximo matutino

alrededor de las 8 horas sino que además éste se mantiene constante hasta que comienza a decaer hacia las 20 horas, para ambos sitios.

Continuar con este trabajo implicará plantear nuevas distribuciones horarias, según los aportes relativos de los distintos sectores productivos a las emisiones de cada especie, para mejorar los resultados de las simulaciones. Estos serán nuevos ajustes que deberán aplicarse al programa emiSURF.

5.5 Evaluación del modelo de transporte químico

CHIMERE

La evaluación de CHIMERE implicó contrastar los resultados de las simulaciones con las mediciones de estaciones de monitoreo continuo, provistas por distintas agencias ambientales locales ya mencionadas en el Capítulo 2. Se compararon las concentraciones de las siguientes especies: NO, NO₂, NO_x, O₃, SO₂, CO y PM10, en cada caso. La evaluación fue realizada sobre las ciudades de Buenos Aires, Córdoba y Bahía Blanca. Como mencionamos, en los dos primeros casos, las estaciones de monitoreo se ubican en zonas donde el tránsito vehicular es la principal fuente de emisión de contaminantes, mientras que en Bahía Blanca el sitio corresponde a cercanías del Polo Petroquímico y puerto.

Las Figuras 5.6 5.7 5.8 muestran tanto la información obtenida de las mediciones de campo como las estimadas por CHIMERE, durante todo el período simulado. Además, la Figura 5.9 exhibe la media y desviación estándar a cada hora del día, a partir de los datos simulados y medidos. Fue necesario multiplicar por algún factor a muchas de las concentraciones de Córdoba y Bahía Blanca, para que puedan ser visibles en las figuras presentadas.

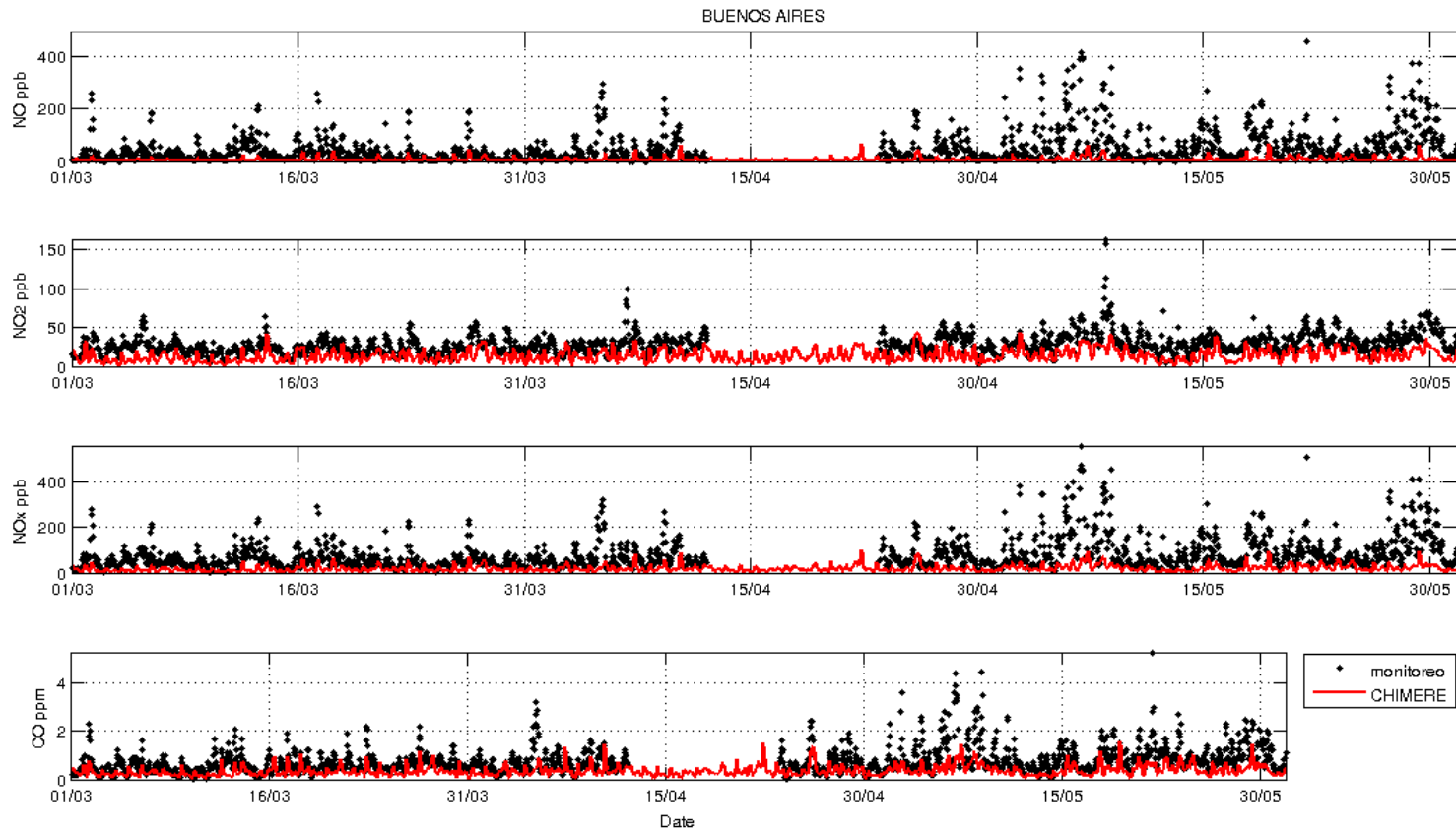


FIGURA 5.6: Simulaciones vs. monitoreo continuo de contaminantes atmosféricos, en todo el periodo de tiempo de simulación para Buenos Aires.

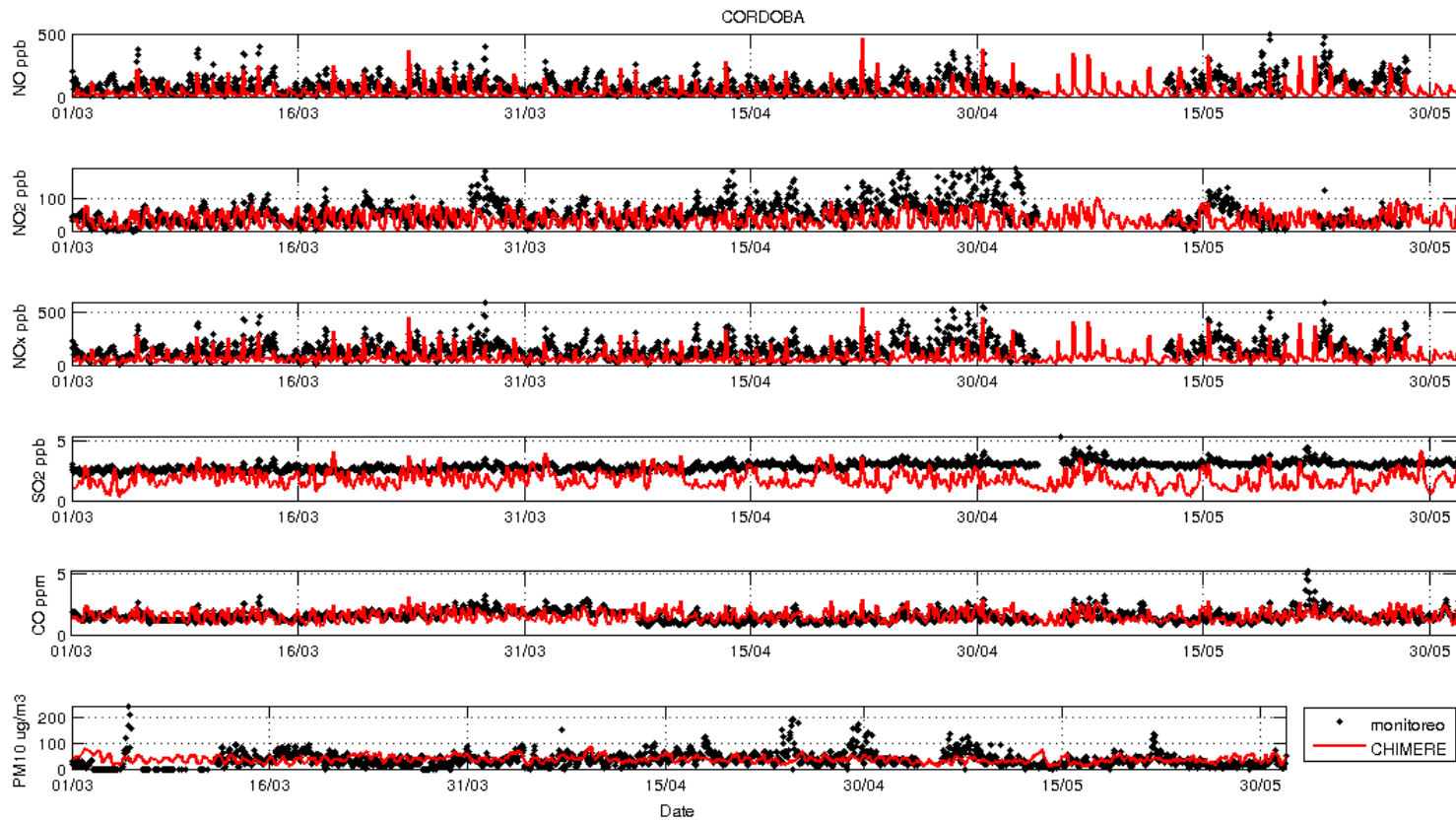


FIGURA 5.7: Simulaciones *vs.* monitoreo continuo de contaminantes atmosféricos, en todo el periodo de tiempo de simulación para Córdoba, donde las concentraciones de NO y NO₂ se muestran multiplicadas por 100 y 10 respectivamente, NO_x es la suma de los resultados anteriores, SO₂, CO y PM₁₀ son multiplicados por un factor de 10.

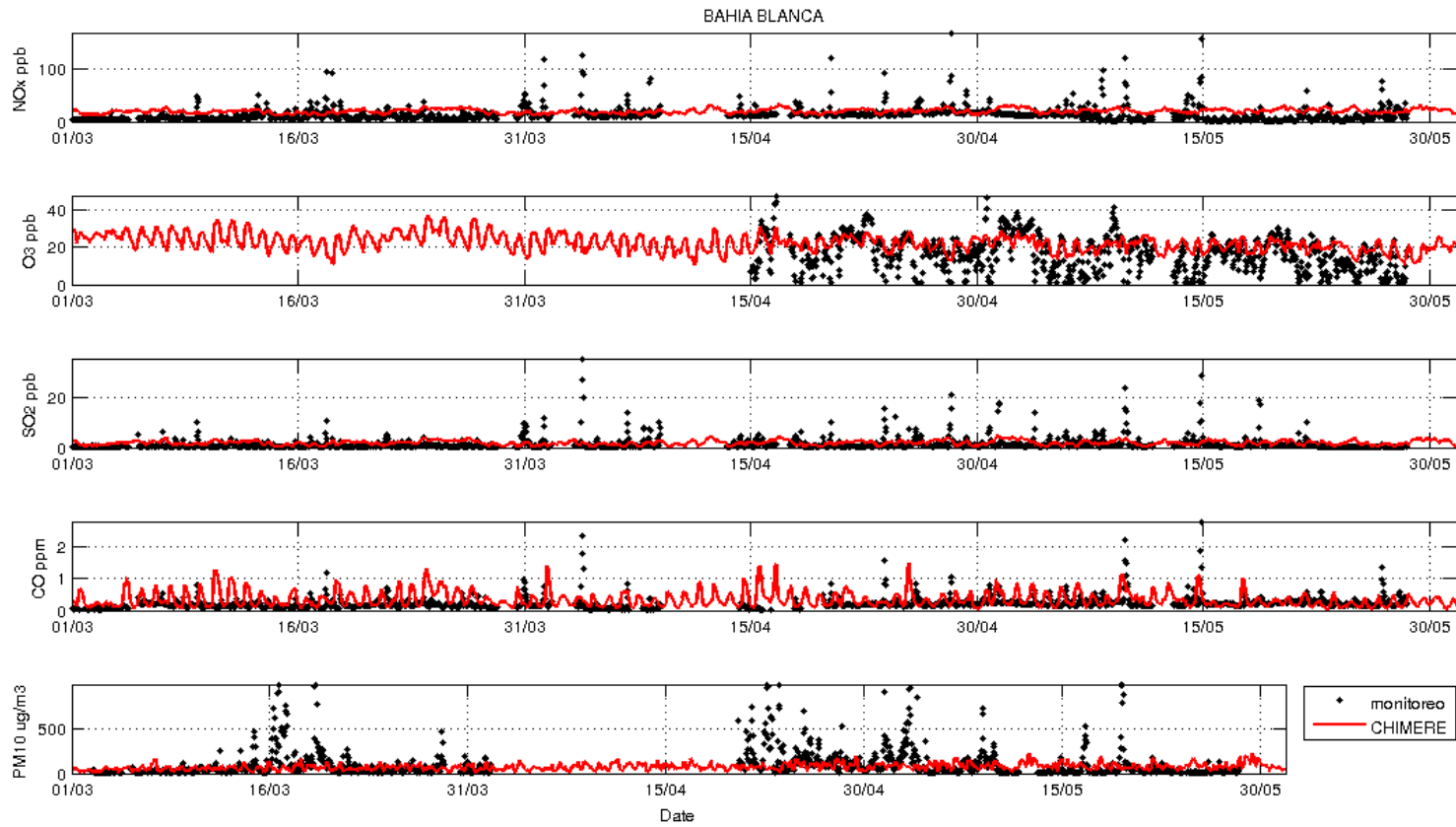


FIGURA 5.8: Simulaciones *vs.* monitoreo continuo de contaminantes atmosféricos, en todo el periodo de tiempo de simulación para Bahía Blanca, donde las concentraciones de NO_x se muestran multiplicadas por un factor de 250, las de CO por 5 y las de PM10 por 100.

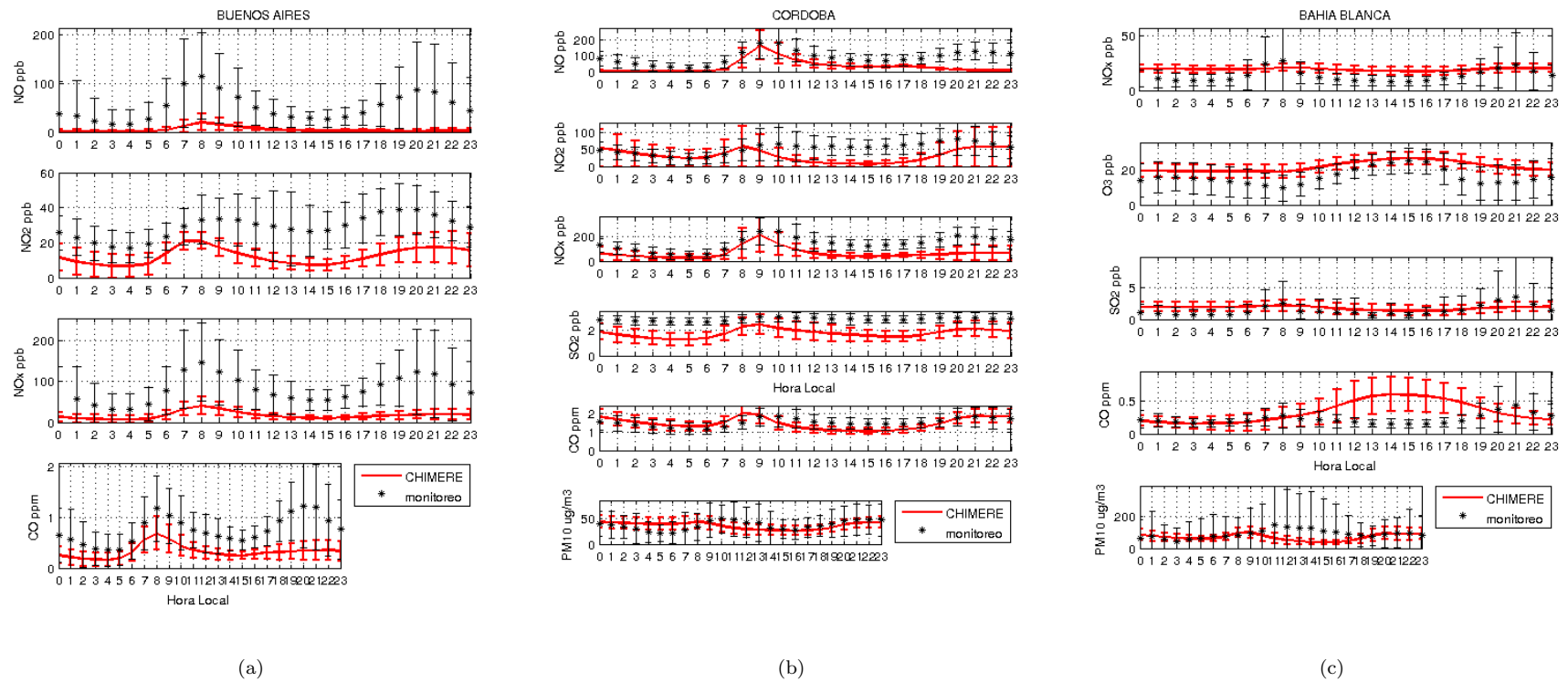


FIGURA 5.9: Variaciones diarias de simulaciones y datos meteorológicos para Buenos Aires, Córdoba y Bahía Blanca, respectivamente. Las concentraciones estimadas de Córdoba son multiplicadas por algún factor, de modo de facilitar su visualización. Así, las concentraciones de NO y NO₂ se muestran multiplicadas por 100 y 10 respectivamente; NO_x es la suma de los resultados anteriores; SO₂, CO y PM10 son multiplicados por un factor de 10. De la misma forma, algunas de las concentraciones de Bahía Blanca se muestran multiplicadas: NO_x por un factor de 250, las de CO por 5 y las de PM10 por 100.

TABLA 5.2: Índices estadísticos de evaluación de simulaciones de calidad del aire.

Sitio	Índice	NO [ppb]	NO ₂ [ppb]	NO _x [ppb]	O ₃ [ppb]	SO ₂ [ppb]	CO [ppm]	PM10 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
Buenos Aires	sesgo	-47,02	-16.65	-62.77			-0.43	
	SMN (%)	-91.50	-57.50	-79.00			-57.34	
	ECM	71.42	18.78	83.38			0.58	
	r	0.50	0.58	0.66			0.63	
Córdoba	sesgo	-90.14	-49.66	-140.07		-2.71	-1.38	-33.86
	SMN (%)	-99.66	-94.03	-97.59		-93.80	-90.34	-90.07
	ECM	103.59	55.88	150.95		2.69	1.43	42.58
	r	0.48	0.07	0.31		0.15	0.28	-0.02
Bahía Blanca	sesgo			-13.26	4.55	0.38	-0.16	-91.10
	SMN (%)			-99.43	27.39	28.00	-70.23	-99.27
	ECM			17.83	5.55	2.43	0.22	152.93
	r			0	0.71	0.07	-0.06	-0.04

Buenos Aires

Es posible observar claramente la manera en que las concentraciones estimadas de las especies evaluadas en Buenos Aires son del mismo orden de magnitud que las concentraciones monitoreadas, principalmente las de NO_2 y CO . Las altas concentraciones de NO observadas, en comparación con las de NO_2 , y su perfil horario permiten identificar al sitio de monitoreo como un lugar con mucho tránsito vehicular.

Evaluando los resultados de CHIMERE, es posible suponer que las emisiones de NO estimadas por EDGAR no son suficientes para que CHIMERE pueda obtener concentraciones similares a las medidas; además, por alguna razón que aún no es clara, el modelo desestima las emisiones de NO y CO producidas en las últimas “horas pico” del día.

Al examinar las diferencias entre las magnitudes de las emisiones de NO_2 calculadas por EDGAR y las obtenidas por CHIMERE, puede observarse que el ciclo diario del NO_2 obtenido de la simulación no muestra el mismo perfil horario que el de las emisiones de la Figura 5.5. Se evidencia que la concentración de NO_2 aumentó hasta superar la concentración de NO y, por esta razón, puede decirse que el modelo calcula la concentración de NO_2 dando peso a las reacciones de oxidación de NO 1.3 y 1.4. El NO_2 es principalmente un contaminante secundario.

Por otro lado, las concentraciones de CO (especie predominantemente emitida) simuladas y observadas son similares en magnitud, aunque siempre subestimadas por CHIMERE. Además, aun cuando el perfil horario de las emisiones estimadas por EDGAR no coincida con el que muestran las mediciones, el modelo no considera al segundo máximo de emisiones en el horario de la tarde.

Córdoba

En el caso de Córdoba, todas las concentraciones simuladas fueron multiplicadas por algún factor de modo de facilitar su visualización: las concentraciones de NO y NO_2 se muestran multiplicadas por 100 y 10 respectivamente. NO_x es la suma de los resultados anteriores; SO_2 , CO y PM_{10} son multiplicados por un factor de 10. Ahora es más sencillo observar cómo ambos perfiles horarios coinciden de forma similar

a los de Buenos Aires, menospreciando el máximo de emisiones de la tarde de NO pero considerando el de CO.

Puede decirse que en general las bajas concentraciones estimadas se deben a las bajas emisiones obtenidas de EDGAR, si se considera que las concentraciones de NO, NO₂ y CO medidas en este sitio son mayores a las de Buenos Aires, prácticamente a toda hora. Además, CHIMERE calcula para SO₂ y PM10, un perfil horario muy similar al monitoreado.

De igual manera que en el caso de Buenos Aires, el modelo desestima las contribuciones de las emisiones de NO consideradas en el máximo de la tarde.

Bahía Blanca

En cuanto a Bahía Blanca, la visualización de los resultados también se mejora al reescalar las concentraciones estimadas por CHIMERE de NO_x, CO y PM10 (por 250, 5 y 100 respectivamente).

Las estimaciones y mediciones de O₃ y SO₂ son del mismo orden y muestran perfiles similares (Figura 5.9). Los índices estadísticos para estas dos especies muestran esta correspondencia, aunque O₃ es mejor estimado que SO₂. Mientras SO₂ tiene un menor error cuadrático medio, O₃ muestra una menor dispersión de los datos. En ambos casos, el sesgo medio normalizado es prácticamente similar. Es importante remarcar que las concentraciones de O₃ que aquí se muestran no difieren de las que se pueden esperar como concentraciones de fondo típicas. Como se mencionó en el Capítulo 1, una concentración típica de O₃ en la capa límite es de 30 ppb.

En general...

Los índices estadísticos calculados muestran resultados coherentes con lo expresado anteriormente. A grandes rasgos no se obtienen buenos resultados, salvo en el caso Buenos Aires donde se subestiman todas las estimaciones, y Bahía Blanca con respecto a O₃ y SO₂.

Incógnitas:

A partir del análisis de estos resultados queda una incógnita por resolver relacionada al desempeño del modelo CHIMERE: *¿por qué el modelo no considera las emisiones correspondientes al pico de emisiones de la tarde, para varias especies?*

5.5.1 Inconmensurabilidad

Para todos los casos se debe tener en cuenta que el problema de la inconmensurabilidad, mencionado al principio del Capítulo, no está resuelto. En este sentido, es necesario recordar que los resultados de las simulaciones representan en una celda 3-D un promedio representativo de distintas variables meteorológicas y químicas, mientras que las estaciones de monitoreo informan sobre las condiciones que ocurren inmediatamente cerca del sensor de medición. El hecho de que cada ciudad de evaluación sólo tenga un sitio de muestreo, y que ese sitio haya sido elegido por las autoridades para monitorear alguna situación en particular (Buenos Aires y Córdoba para emisiones vehiculares de mediana y alta intensidad respectivamente, y en Bahía Blanca para emisiones del polo petroquímico) es otro inconveniente para realizar esta evaluación, ya que no se conocen las concentraciones de fondo de estos contaminantes, es decir aquellas presentes sin las emisiones de eventos particulares como las que las agencias pretenden monitorear. De esta forma, la comparación horaria entre concentraciones puntuales de algunas pocas estaciones de monitoreo y volúmenes de la atmósfera con baja resolución no es la más adecuada, sin embargo, esta fue la única manera disponible para realizar este estudio.

5.6 Modificación en las configuraciones meteorológicas y espaciales**5.6.1 Pruebas de sensibilidad para la capa límite atmosférica**

Una de las variables meteorológicas con gran influencia en la química troposférica y en el transporte de especies es la altura de la capa límite atmosférica (en adelante también

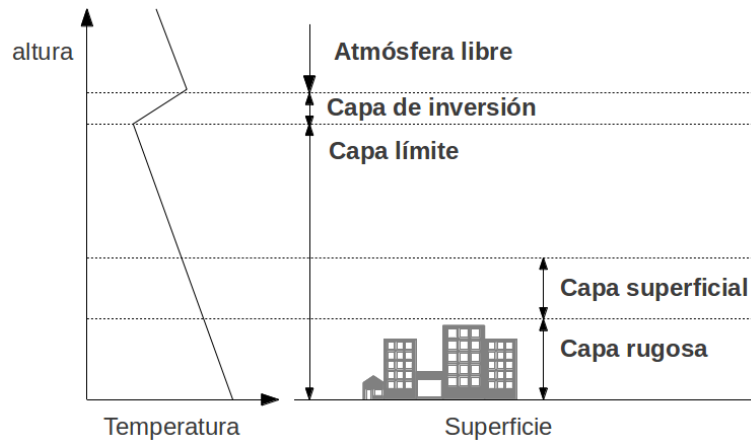


FIGURA 5.10: Esquema de la capa límite atmosférica

se utilizará el acrónimo CL), que se define como la porción de la tropósfera más cercana a la superficie terrestre y que está, por esto, muy influenciada por ella (Figura 5.10). Dentro de la capa límite no sólo se producen grandes fluctuaciones en la velocidad de vientos locales, temperatura, humedad, etc., sino que también el mezclado vertical es importante. Dos subcapas integran la capa límite: la capa rugosa con un espesor aproximado al parámetro de rugosidad superficial y la capa superficial (de una altura alrededor de un décimo de la CL) que está principalmente afectada por la naturaleza de la superficie. La turbulencia atmosférica generada en la capa límite alcanza una altura acotada por una discontinuidad térmica (capa de inversión) a partir de la cual el comportamiento de la atmósfera no presenta estos grandes intercambios de energía y materia (atmósfera libre).

Así, las especies contaminantes emitidas desde la superficie quedan principalmente confinadas dentro de la CL, donde se transportan y difunden. Es por esto que hay una relación directa entre la calidad del aire y el espesor de esta capa atmosférica.

Los procesos que contribuyen al aumento del espesor de la capa límite son: la fuerte convección producida por el calentamiento de la superficie, la rugosidad del terreno y la turbulencia generada por la cizalladura del viento en el tope de la capa límite asociada a la diferencia de velocidad que se produce en la zona de entrada del aire desde la tropósfera libre.

El sistema de ecuaciones que describe la turbulencia no está cerrado ya que la cantidad de incógnitas es superior a la cantidad de ecuaciones. Además, el sistema se

complejiza cada vez que el orden de las ecuaciones aumenta. Por este motivo, la solución o el “cierre” del problema se realiza sobre un orden dado. Para modelos atmosféricos de capa límite, mesoescala y de circulación general es común el uso de esquemas de cierre de primer orden (Bianco 2008). Aunque se aplican distintas teorías a la estimación de la altura de la capa límite, existen dos formas generales de obtener la solución: cierre local y cierre no local. En el cierre local se supone que la turbulencia es siempre a nivel sub-grilla, en cambio los cierres no locales ponen en comunicación celdas de grilla no adyacentes utilizando coeficientes de intercambio. Esta última aproximación es más realista ya que las observaciones muestran que las grandes turbulencias pueden transportar fluidos a distancias similares a las de advección (Stull, 1988).

El modelo meteorológico WRF permite modificar la configuración de sus parámetros para tener en cuenta distintas alternativas de cálculo de la altura de la capa límite. Así, se consideran las variables `sf_sfclay_physics` y `bl_pbl_physics` que se refieren a la capa superficial y la capa límite atmosférica respectivamente.

Las opciones elegidas en este trabajo para realizar las pruebas de sensibilidad de capa límite, se presentan en la Tabla 5.3 (para más detalles referirse al Manual de Usuarios y a la descripción técnica del modelo ARW-WRF de www.mmm.ucar.edu/wrf/users/).

TABLA 5.3: Esquemas de Capa Límite utilizados en el modelo meteorológico WRF (adaptado de Dudhia, 2011). Aquí, NL y L se refieren a los cierres no local y local respectivamente; K a los perfiles de turbulencia (*eddy*), y TKE a la energía cinética de turbulencia (del inglés *turbulence kinetic energy*). a) Hong, Noh and Dudhia (2006, MWR). b) Janjic (1994, MWR). c) Sukoriansky, Galperin and Perov (2005, BLM). d) Nakanishi and Niino (2006, BLM).

bl_pbl	Esquema	Cierre	Variable de pronóstico	sf_sfclay	Esquema
1	YSU ^a	NL	K	1	MM5 Monin-Obukhov
2	MYJ ^b	L	TKE	2	Monin-Obukhov (Janjic Eta)
4	QNSE ^c	NL	TKE	4	QNSE
5	MYNN2 ^d	L	TKE	1	MM5 Monin-Obukhov

La Figura 5.11 muestra la altura de capa límite para las distintas configuraciones utilizadas en simulaciones del modelo meteorológico WRF en los tres sitios de muestreo, durante los días 2 y 3 de abril del 2009. Cabe mencionar que no se cuenta con mediciones del espesor de la capa para contrastar los resultados de las simulaciones. De todas formas, la Figura 5.11 b) muestra la media y desviación estándar de la altura de

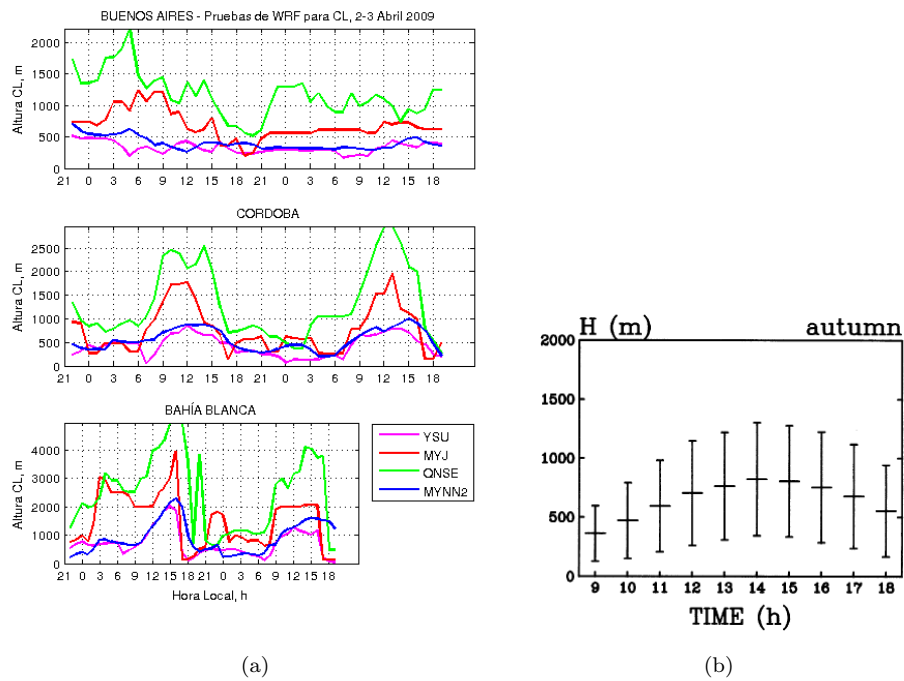


FIGURA 5.11: Altura de capa límite para a) los esquemas YSU, MYJ, QNSE y MYNN2 de WRF, para los tres sitios de estudio en los días 2 y 3 de abril del 2009, y b) altura de la capa límite para la ciudad de Buenos Aires en otoño (Ulke y Mazzeo 1998).

la capa límite en la ciudad de Buenos Aires obtenida en otoño en un estudio estacional de 5 años, por Ulke y Mazzeo (1998).

Al contrastar las dos figuras presentadas, es posible apreciar que en la ciudad de Buenos Aires las configuraciones QNSE y MYJ pueden estar sobreestimando la altura de la CL. En cambio, YSU y MYNN2 alcanzan valores similares a los obtenidos por Ulke y Mazzeo (1998) sólo que no muestran el perfil diurno típico.

En general en los tres sitios se observa una alta sensibilidad a la configuración `b1_pb1` elegida, principalmente en el máximo diario y durante la noche. Esta sensibilidad es más marcada en Bahía Blanca, luego en Córdoba y, por último, en Buenos Aires; esto evidencia la necesidad de ajustar los parámetros vinculados con la estimación de la altura de la CL para cada sitio en particular.

En la Figura 5.12 se muestran los resultados de aplicar, en el sistema de modelado, los distintos esquemas presentados en la Tabla 5.3 a las variables meteorológicas -dirección y velocidad de viento, temperatura y presión- y a las especies NO, NO₂, NO_x y CO simuladas, según se observaron los días 2 y 3 de abril del 2009 sobre Buenos Aires.

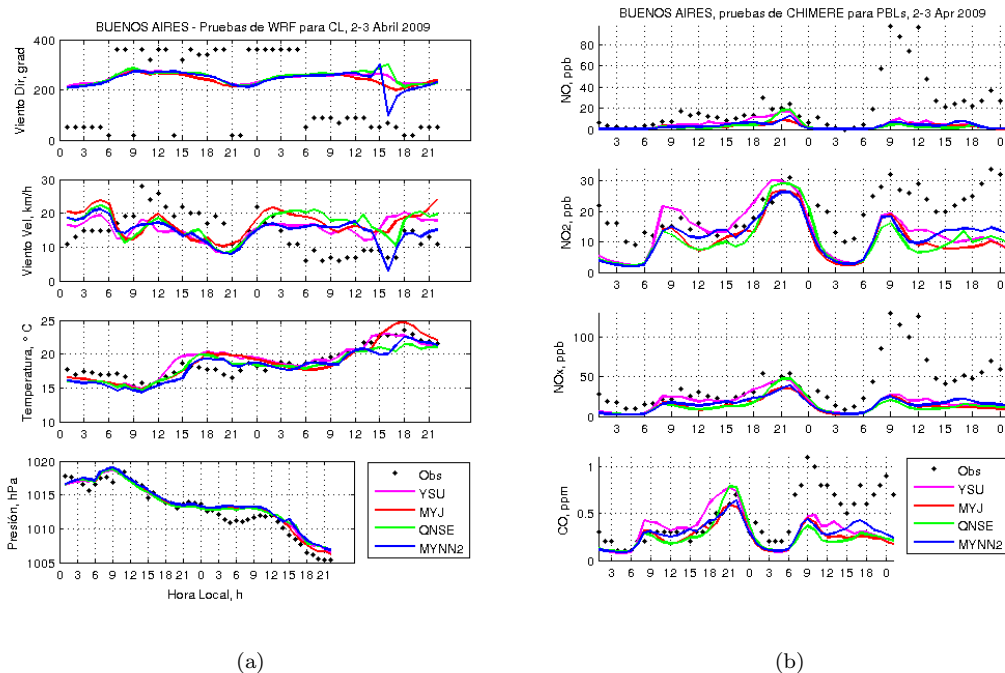


FIGURA 5.12: Pruebas de distintas configuraciones de WRF para evaluar 5 opciones de capa límite, para a) Buenos Aires, b) Córdoba y c) Bahía Blanca. Las opciones se comparan también con las variables observadas en las estaciones meteorológicas.

Las variables meteorológicas que muestran mayor sensibilidad al cambio de configuración del modelo WRF son la temperatura y la velocidad del viento en todo el período simulado tanto en el día como en la noche. En cambio, la dirección del viento y la presión no muestran variaciones significativas salvo en las últimas horas simuladas.

En el caso de las variables químicas, la estimación de concentraciones es sensible a los distintos esquemas de CL principalmente en los períodos diurnos y hasta las 18 horas de los dos días simulados. Durante la noche, cuando la capa límite es estable, las concentraciones son similares en todos los esquemas.

5.6.2 Anidado sobre Buenos Aires

Utilizando el sistema de modelado es posible aplicar dominios espaciales con mejor resolución que utilicen como condiciones iniciales, hora a hora, los resultados simulados por un dominio mayor que lo incluya. Así, se realizó la prueba de utilizar un “dominio

anidado” tanto para CHIMERE como para WRF. Para ello se definen dos tipos de dominios:

- un dominio padre o principal, de la misma dimensión y resolución que el dominio definido en el Capítulo 3,
- un dominio hijo o anidado para WRF y CHIMERE, enfocado en la ciudad de Buenos Aires.

Los dominios horizontales anteriores, definidos para ambos modelos, se muestran en la Figura 5.13. La resolución espacial horizontal del dominio anidado para WRF se definió de 10 km, con 28 niveles verticales hasta alcanzar una presión de 50 hPa; mientras que para CHIMERE el dominio anidado se estableció con una resolución de 0.1° y 8 niveles verticales que alcanzan los 500 hPa de presión en la atmósfera (ambos dominios tienen la misma resolución vertical que los principales).

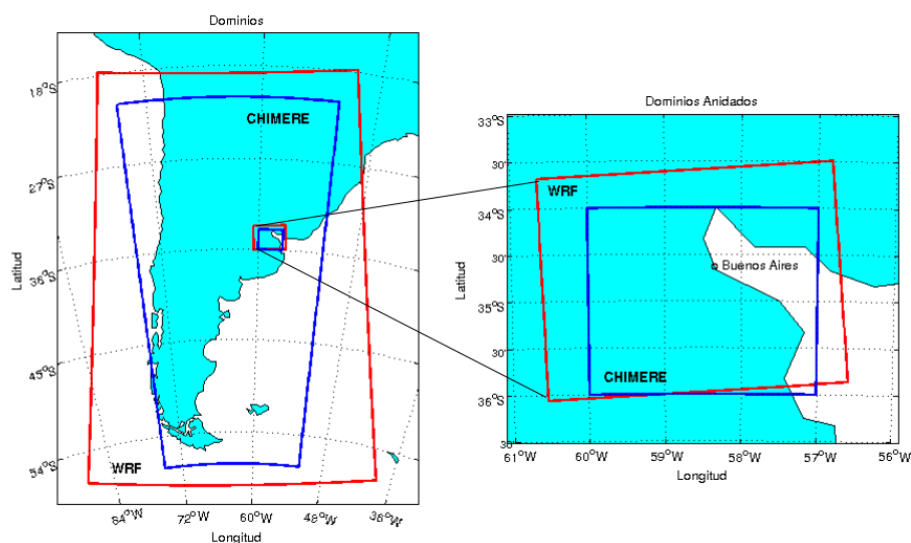


FIGURA 5.13: Dominios principal y anidados establecidos para WRF y CHIMERE, sobre Buenos Aires.

La ejecución de los modelos se realizó con una opción de configuración a fin de que ambos dominios, principal y anidado, compartan información en los dos sentidos y para cada paso de tiempo. Es una configuración acoplada u *online*. De esta forma, el dominio principal alimenta con condiciones iniciales al dominio anidado a cada tiempo mientras que el anidado calcula para su resolución más fina las variables y otorga al dominio principal sus resultados de modo que los considere en su simulación.

Los resultados de las simulaciones, realizadas durante los días 2 y 3 de abril del 2009, se comparan con las mediciones de estaciones meteorológicas y de monitoreo continuo de contaminantes del aire, como se muestra en la Figura 5.14.

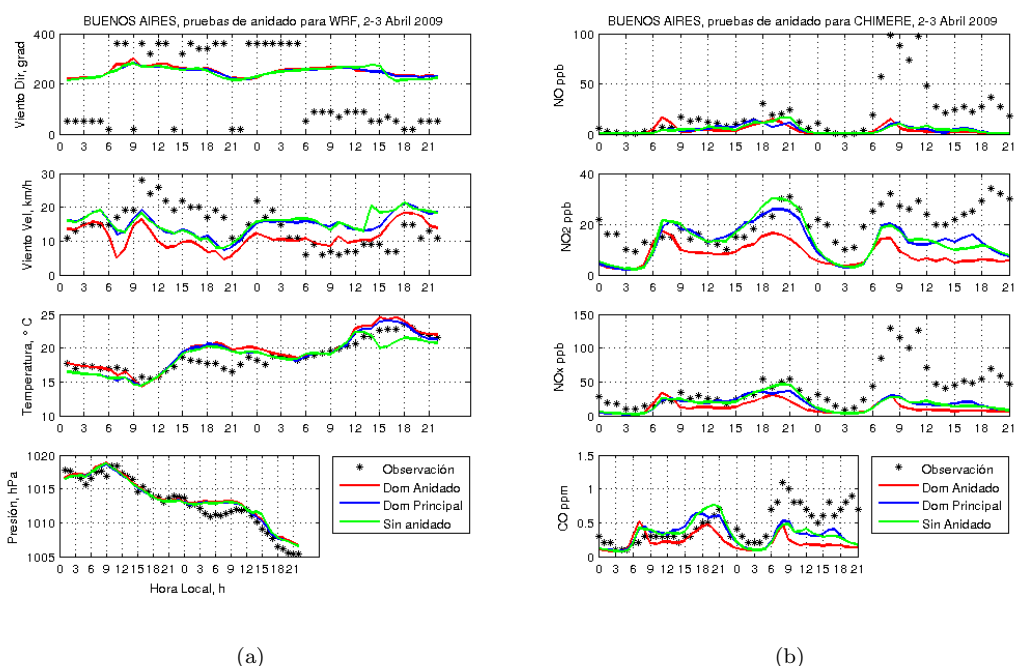


FIGURA 5.14: Resultados de ambos modelos, a) WRF y b) CHIMERE, para el uso de un dominio anidado, un dominio principal acoplado con uno anidado y un dominio sin anidar con las mismas características que el principal.

La figura que muestra los resultados de las simulaciones meteorológicas permite observar que las mayores diferencias entre el uso de los distintos dominios se da principalmente en la estimación de la velocidad del viento y la temperatura. En el primer caso, el dominio anidado subestima aún más las velocidades más altas que se dan desde la mañana a la tarde del primer día; sin embargo, esta situación mejora considerablemente si se observan las velocidades del viento del segundo día. Mientras tanto, no hay diferencias significativas entre la estimación de esta variable realizada por el dominio principal acoplado con el anidado y el dominio principal sin anidar. En el caso de la temperatura, el dominio anidado y el principal acoplado muestran un mejor desempeño que el dominio sin anidar.

En cuanto al cálculo de concentraciones de contaminantes atmosféricos, el resultado de aplicar un dominio anidado al modelo CHIMERE no muestra cambios importantes en la estimación de NO comparado con el obtenido con un dominio sin anidar.

Aun así, hay una importante subestimación en la producción de NO_2 probablemente debido a alguna variable meteorológica simulada no considerada en este análisis. En el caso de CO , otro contaminante primario, también hay una subestimación de su concentración. En el futuro será importante evaluar los motivos de estos resultados ya que junto a mejores inventarios de emisión se podrían obtener simulaciones que puedan aproximarse más a las condiciones reales.

Capítulo 6

Conclusiones y Proyecciones

6.1 En conclusión...

- Fue posible implementar el sistema de modelado WRF-CHIMERE-EDGAR sobre el dominio espacial de nuestro territorio nacional, para realizar los estudios aquí presentados.
- La dificultad que representó obtener datos de campo de contaminantes se corresponde con el incipiente desarrollo y control de la problemática en Argentina. Esta dificultad se traslada a la acotada evaluación que pudo realizarse sobre el desempeño del sistema de modelado por no contar con datos de monitoreo continuo en zonas clave del país y de áreas representativas de distintas situaciones (urbanas, rurales e industriales).
- Fue posible realizar la interfaz entre EDGAR-CHIMERE para la aplicación del modelo de transporte químico sobre Argentina. Dicha interfaz puede ser utilizada tanto para nuevos estudios sobre el territorio nacional como por otros países del mundo que no tengan aún inventarios de emisiones regionales, gracias al carácter global de EDGAR.
- La comparación de la base de datos EDGAR con el inventario de emisiones desarrollado por la Fundación Bariloche (2005) y con las mediciones in situ de contaminantes, muestra que hay una subestimación de las emisiones por parte del inventario utilizado.

- La evaluación del desempeño de WRF muestra buenos resultados para las variables meteorológicas analizadas, en los sitios de evaluación indicados por la presencia de monitoreo continuo de especies contaminantes.
- La evaluación del desempeño de CHIMERE muestra deficiencias, principalmente para las ciudades de Córdoba y Bahía Blanca, debido a la gran subestimación de emisiones en esos sitios por parte del inventario de emisiones EDGAR. De todas formas, en el caso de la ciudad de Buenos Aires los resultados de las simulaciones son comparables a las mediciones, aun teniendo en cuenta el problema de la incommensurabilidad.
- Se realizaron pruebas de sensibilidad de la capa límite atmosférica que indicaron la importancia de la elección de una configuración adecuada para la aplicación sobre un dominio espacial elegido. En este trabajo se evaluó la altura de la capa límite en los tres sitios elegidos, y a pesar de no contar con mediciones para contrastar, ya se observan diferencias entre el comportamiento de las distintas configuraciones en cada sitio. En cuanto a la ciudad de Buenos Aires, las variables meteorológicas que presentan mayor sensibilidad al cambio de configuración de CL son la temperatura y la velocidad del viento durante todo el período simulado. En cambio, en el caso de las variables químicas, la estimación de concentraciones es sensible a los distintos esquemas utilizados principalmente en los períodos diurnos y hasta las 21 horas. Durante la noche, la capa límite es estable y las concentraciones estimadas son similares en todos los esquemas.
- Se realizaron simulaciones sobre Buenos Aires utilizando un dominio anidado acoplado con el principal. Las mayores diferencias entre el uso de dominios sin anidar y anidados se observan en la estimación de la velocidad del viento y la temperatura. Con respecto a los resultados de las simulaciones de especies contaminantes, no se observan grandes diferencias entre estas y las mediciones de los contaminantes primarios, pero sí en relación a los secundarios, probablemente debido a alguna variable meteorológica simulada no considerada en el análisis.
- No fue posible realizar evaluaciones del sistema de modelado utilizando productos satelitales en el tiempo disponible para la realización de la tesis.

En términos generales, se alcanzaron los objetivos planteados inicialmente. Se obtuvieron mapas con la distribución espacial y temporal de especies que afectan la calidad del aire, sobre el territorio nacional, implementando por primera vez un modelo de transporte químico en este dominio espacial. También se evaluó de forma gráfica y estadística el desempeño del sistema, utilizando datos de campo brindados por distintas instituciones públicas -éstas pusieron a disposición su información y experiencia y de esta manera colaboraron significativamente con la concreción de este trabajo.

Enriquecer este sistema implicaría, necesariamente, continuar caracterizando la calidad del aire que respiramos potenciando los esfuerzos con trabajos de cooperación entre los distintos grupos que están trabajando en el tema.

6.2 Entonces... (Proyecciones)

es importante continuar trabajando en:

- Realizar perfiles temporales acordes a nuestra situación nacional.
- Mejorar el inventario de emisiones EDGAR v4.2 tomando otras versiones que puedan aportar datos de PM2.5, carbono orgánico y negro (EDGAR-HTAP).
- Utilizar información de uso de suelo desarrollado por el Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria y topografía de mejor resolución producida por el Instituto Geográfico Nacional, a fin de mejorar las condiciones iniciales y resolución del sistema de modelado.
- Construir un inventario de emisiones biogénicas nacional.
- Analizar la forma más eficiente de implementar dominios anidados sobre regiones de interés que ayuden a aproximar los resultados de las simulaciones a la realidad.
- Aplicar el sistema de modelado WRF-CHIMERE-EDGAR sobre Europa para realizar una segunda prueba de la implementación de EDGAR, comparando con mediciones hechas a campo.

- Operativizar el funcionamiento del sistema de modelado para la obtención de mapas con distribución espacial de ozono y especies químicas precursoras de ozono troposférico, a fin de que este sistema permita que la información simulada pueda ser accesible a toda la sociedad y además pueda ser de utilidad para distintas instituciones gubernamentales de control de emisiones y de salud.

Apéndice A

Apéndice A: Códigos de conversión de sectores IPCC a SNAP

Los siguientes códigos se escribieron para Matlab R2008b.

A.1 Conversión de NO_x de sectores IPCC a SNAP

```
% Conversor de IPCC a SNAP para NOx  
% datos de entrada: archivos TXT y CSV de EDGAR v4.2  
% Fernanda Garcia  
% 2013  
  
clear all  
close all  
  
% Output grid parameters  
dx = 0.1;  
dy = 0.1;  
xmin = -180;  
xmax = 180;  
ymin = -90;  
ymax = 90;  
x = xmin:dx:xmax;  
y = ymin:dy:ymax;
```

```
nx = length(x);
ny = length(y);
nsnap = 10;

% Data dir, todos los archivos se encuentran en el mismo directorio
datadir = ['/home/data/EDGAR 4.2'];

% Read total IPCC
filename = [datadir filesep 'v4.2_EM_NOX_2008.csv'];
NOx_IPCC_total = importdata(filename, ',', 11);
NOx_IPCC_total = NOx_IPCC_total.data;

% Read IPCC 1A1a
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_1A1a.txt'];
NOx_1A1a = importdata(filename, ',', 3);
NOx_1A1a = NOx_1A1a.data;

% Read IPCC 1A2
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_1A2.txt'];
NOx_1A2 = importdata(filename, ',', 3);
NOx_1A2 = NOx_1A2.data;

% Read IPCC 1A3acde
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_1A3a_c_d_e.txt'];
NOx_1A3acde = importdata(filename, ',', 3);
NOx_1A3acde = NOx_1A3acde.data;

% Read IPCC 1A3b
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_1A3b.txt'];
NOx_1A3b = importdata(filename, ',', 3);
NOx_1A3b = NOx_1A3b.data;

% Read IPCC 1A4
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_1A4.txt'];
NOx_1A4 = importdata(filename, ',', 3);
NOx_1A4 = NOx_1A4.data;

% Read IPCC 1B2ac 1A1bc
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_1B2a_c_1A1b_c.txt'];
NOx_1B2ac_1A1bc = importdata(filename, ',', 3);
NOx_1B2ac_1A1bc = NOx_1B2ac_1A1bc.data;

% Read IPCC 2BCD
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_2.txt'];
NOx_2BCD = importdata(filename, ',', 3);
NOx_2BCD = NOx_2BCD.data;
```

```

% Read IPCC 4B
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_4B.txt'];
NOx_4B = importdata(filename,',' ,3);
NOx_4B = NOx_4B.data;

% Read IPCC 4C 4D
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_4C_4D.txt'];
NOx_4CD = importdata(filename,',' ,3);
NOx_4CD = NOx_4CD.data;

% Read IPCC 4F
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_4F.txt'];
NOx_4F = importdata(filename,',' ,3);
NOx_4F = NOx_4F.data;

% Read IPCC 5A C D F 4E
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_5A_C_D_F_4E.txt'];
NOx_5ACDF_4E = importdata(filename,',' ,3);
NOx_5ACDF_4E = NOx_5ACDF_4E.data;

% Read IPCC 6A 6C
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_6A_6C.txt'];
NOx_6AC = importdata(filename,',' ,3);
NOx_6AC = NOx_6AC.data;

% Read IPCC 7A
filename = [datadir filesep 'v42_NOx_2008_IPCC_7A.txt'];
NOx_7A = importdata(filename,',' ,3);
NOx_7A = NOx_7A.data;

clear datadir
clear filename

% NOx IPCC partial
NOx_IPCC_p = NOx_IPCC_total(39,:)/NOx_IPCC_total(39,58);

% Transform IPCC 1A1bc_1B2ac --> 1A1bc + 1B2
NOx_1A1bc = [NOx_1B2ac_1A1bc(:,1) NOx_1B2ac_1A1bc(:,2) NOx_1B2ac_1A1bc(:,3)...
    *NOx_IPCC_p(1,2)/(NOx_IPCC_p(1,2)+NOx_IPCC_p(1,11))];
NOx_1B2 = [NOx_1B2ac_1A1bc(:,1) NOx_1B2ac_1A1bc(:,2) NOx_1B2ac_1A1bc(:,3)...
    -NOx_1A1bc(:,3)];
clear NOx_1B2ac_1A1bc;

% % Transform IPCC 5A C D F 4E --> 5D
NOx_5D = [NOx_5ACDF_4E(:,1) NOx_5ACDF_4E(:,2) NOx_5ACDF_4E(:,3)*NOx_IPCC_p(1,45)...
    /(NOx_IPCC_p(1,41)+NOx_IPCC_p(1,43)+NOx_IPCC_p(1,44)+NOx_IPCC_p(1,45))];
clear NOx_5ACDF_4E;

```

```

% Create the output array
NOx_emis = zeros(nx,ny,nsnap);

% Fill the output array for SNAP1
j = fix(round((NOx_1A1a(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_1A1a(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_1A1a(:,3);
NOx_emis(:,:,1) = tmp;
clear NOx_1A1a

j = fix(round((NOx_1A1bc(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_1A1bc(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_1A1bc(:,3);
NOx_emis(:,:,1) = NOx_emis(:,:,1) + tmp;
clear NOx_1A1bc

% Fill the output array for SNAP2
j = fix(round((NOx_1A4(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_1A4(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_1A4(:,3);
NOx_emis(:,:,2) = tmp;
clear NOx_1A4

% Fill the output array for SNAP3
j = fix(round((NOx_1A2(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_1A2(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_1A2(:,3);
NOx_emis(:,:,3) = tmp;
clear NOx_1A2

% Fill the output array for SNAP4
j = fix(round((NOx_2BCD(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_2BCD(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);

```

```

ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_2BCD(:,3);
NOx_emis(:,:,4) = tmp;
clear NOx_2BCD

% Fill the output array for SNAP5
j = fix(round((NOx_1B2(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_1B2(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_1B2(:,3);
NOx_emis(:,:,5) = tmp;
clear NOx_1B2

j = fix(round((NOx_7A(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_7A(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_7A(:,3);
NOx_emis(:,:,5) = NOx_emis(:,:,5) + tmp;
clear NOx_7A

% Fill the output array for SNAP6
% NO IPCC DATA TO TRANSFORM NOx FROM IPCC TO SNAP 6.

% Fill the output array for SNAP7
j = fix(round((NOx_1A3b(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_1A3b(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_1A3b(:,3);
NOx_emis(:,:,7) = tmp;
clear NOx_1A3b

% Fill the output array for SNAP8
j = fix(round((NOx_1A3acde(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_1A3acde(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_1A3acde(:,3);
NOx_emis(:,:,8) = tmp;
clear NOx_1A3acde

% Fill the output array for SNAP9
j = fix(round((NOx_6AC(:,1)-ymin)/dy + 1));

```

```

i = fix(round((NOx_6AC(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_6AC(:,3);
NOx_emis(:,:,9) = tmp;
clear NOx_6AC

```

```

% Fill the output array for SNAP10

```

```

j = fix(round((NOx_4B(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_4B(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_4B(:,3);
NOx_emis(:,:,10) = tmp;
clear NOx_4B

```

```

j = fix(round((NOx_4CD(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_4CD(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_4CD(:,3);
NOx_emis(:,:,10) = NOx_emis(:,:,10) + tmp;
clear NOx_4CD

```

```

j = fix(round((NOx_4F(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_4F(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_4F(:,3);
NOx_emis(:,:,10) = NOx_emis(:,:,10) + tmp;
clear NOx_4F

```

```

j = fix(round((NOx_5D(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NOx_5D(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NOx_5D(:,3);
NOx_emis(:,:,10) = NOx_emis(:,:,10) + tmp;
clear NOx_5D

```

```

clear tmp
clear i
clear j
clear ind

```

```

% TXT File creation with Global NOx emission

```

```

% (1 / lon index / lat index / SNAP1 SNAP2 SNAP3 SNAP4 SNAP5 SNAP6 SNAP7

```



```

% SNAP8 SNAP9 SNAP10)
fid = fopen('NOx_totalSNAPs.txt', 'wt');
for i=1:ny
    for j=1:nx
        if (sum(NOx_emis(j,i,:)) > 0)
            fprintf(fid, '%4d %5d %5d %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g'...
                '%15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g\n',1,j,i,NOx_emis(j,i,:));
        end
    end
end
end
fclose(fid)

```

A.2 Conversión de NMVOC de sectores IPCC a SNAP

```

% Conversor de IPCC a SNAP para NMVOC
% datos de entrada: archivos TXT y CSV de EDGAR v4.2
% Fernanda Garcia
% 2013

clear all
close all

% Output grid parameters
dx = 0.1;
dy = 0.1;
xmin = -180;
xmax = 180;
ymin = -90;
ymax = 90;
x = xmin:dx:xmax;
y = ymin:dy:ymax;
nx = length(x);
ny = length(y);
nsnap = 10;

% Data dir, todos los archivos se encuentran en el mismo directorio
datadir = ['/home/data/EDGAR 4.2'];

% Read total IPCC
filename = [datadir filesep 'v4.2_NMVOC_2008.csv'];
NMVOC_IPCC_total = importdata(filename, ',', 11);
NMVOC_IPCC_total = NMVOC_IPCC_total.data;

```

```
% Read IPCC 1A1a
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_1A1a.txt'];
NMVOc_1A1a = importdata(filename,',' ,3);
NMVOc_1A1a = NMVOc_1A1a.data;

% Read IPCC NMVOc_1A1bc_1B_2C1_2C2
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_1A1b_c_1B_2C1_2C2.txt'];
NMVOc_1A1bc_1B_2C1_2C2 = importdata(filename,',' ,3);
NMVOc_1A1bc_1B_2C1_2C2 = NMVOc_1A1bc_1B_2C1_2C2.data;

% Read IPCC 1A2
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_1A2.txt'];
NMVOc_1A2 = importdata(filename,',' ,3);
NMVOc_1A2 = NMVOc_1A2.data;

% Read IPCC 1A3a c b e
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_1A3a_c_d_e.txt'];
NMVOc_1A3acde = importdata(filename,',' ,3);
NMVOc_1A3acde = NMVOc_1A3acde.data;

% Read IPCC 1A3b
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_1A3b.txt'];
NMVOc_1A3b = importdata(filename,',' ,3);
NMVOc_1A3b = NMVOc_1A3b.data;

% Read IPCC 1A4
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_1A4.txt'];
NMVOc_1A4 = importdata(filename,',' ,3);
NMVOc_1A4 = NMVOc_1A4.data;

% Read IPCC 2A B D E F G
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_2A_B_D_E_F_G.txt'];
NMVOc_2ABDEFG = importdata(filename,',' ,3);
NMVOc_2ABDEFG = NMVOc_2ABDEFG.data;

% Read IPCC 3
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_3.txt'];
NMVOc_3 = importdata(filename,',' ,3);
NMVOc_3 = NMVOc_3.data;

% Read IPCC 4F
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_4F.txt'];
NMVOc_4F = importdata(filename,',' ,3);
NMVOc_4F = NMVOc_4F.data;

% Read IPCC 5A C D F 4E
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOc_2008_IPCC_5A_C_D_F_4E.txt'];
NMVOc_5ACDF_4E = importdata(filename,',' ,3);
```

```

NMVOC_5ACDF_4E = NMVOC_5ACDF_4E.data;

% Read IPCC 6A 6C
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOC_2008_IPCC_6A_6C.txt'];
NMVOC_6AC = importdata(filename, ',', 3);
NMVOC_6AC = NMVOC_6AC.data;

% Read IPCC 7A
filename = [datadir filesep 'v42_NMVOC_2008_IPCC_7A.txt'];
NMVOC_7A = importdata(filename, ',', 3);
NMVOC_7A = NMVOC_7A.data;

clear datadir
clear filename

% NMVOC IPCC partial
NMVOC_IPCC_p = NMVOC_IPCC_total(39,:)/NMVOC_IPCC_total(39,58);

% Transform IPCC 1A1bc_1B_2C1_2C2 --> 1A1bc + 1B + 2C
NMVOC_1A1bc = [NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2(:,1) NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2(:,2)...
  NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2(:,3)*NMVOC_IPCC_p(1,2)/(NMVOC_IPCC_p(1,2)+...
  NMVOC_IPCC_p(1,10)+NMVOC_IPCC_p(1,11)+NMVOC_IPCC_p(1,18))];
NMVOC_1B = [NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2(:,1) NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2(:,2) ...
  (NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2(:,3)*(NMVOC_IPCC_p(1,10)+NMVOC_IPCC_p(1,11))...
  /(NMVOC_IPCC_p(1,2)+NMVOC_IPCC_p(1,10)+NMVOC_IPCC_p(1,11)+...
  NMVOC_IPCC_p(1,18))];
NMVOC_2C = [NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2(:,1) NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2(:,2)...
  NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2(:,3)*NMVOC_IPCC_p(1,18)/(NMVOC_IPCC_p(1,2)+...
  NMVOC_IPCC_p(1,10)+NMVOC_IPCC_p(1,11)+NMVOC_IPCC_p(1,18))];
clear NMVOC_1A1bc_1B_2C1_2C2;

% Transform IPCC 2A B D E F G --> 2ABDE 2FG
NMVOC_2ABDE = [NMVOC_2ABDEFG(:,1) NMVOC_2ABDEFG(:,2) NMVOC_2ABDEFG(:,3)...
  *(NMVOC_IPCC_p(1,14)+NMVOC_IPCC_p(1,15)+NMVOC_IPCC_p(1,16)+NMVOC_IPCC_p(1,17)...
  +NMVOC_IPCC_p(1,19)+NMVOC_IPCC_p(1,20))/(NMVOC_IPCC_p(1,14)+NMVOC_IPCC_p(1,15)...
  +NMVOC_IPCC_p(1,16)+NMVOC_IPCC_p(1,17)+NMVOC_IPCC_p(1,19)+NMVOC_IPCC_p(1,20)+...
  NMVOC_IPCC_p(1,21)+NMVOC_IPCC_p(1,22)+NMVOC_IPCC_p(1,23)+NMVOC_IPCC_p(1,24)...
  +NMVOC_IPCC_p(1,25)+NMVOC_IPCC_p(1,26)+NMVOC_IPCC_p(1,27)+NMVOC_IPCC_p(1,28)...
  +NMVOC_IPCC_p(1,29))];
NMVOC_2FG = [NMVOC_2ABDEFG(:,1) NMVOC_2ABDEFG(:,2) NMVOC_2ABDEFG(:,3)...
  -NMVOC_2ABDE(:,3)];
clear NMVOC_2ABDEFG;

% Transform IPCC 5A C D F 4E --> 5D
NMVOC_5D = [NMVOC_5ACDF_4E(:,1) NMVOC_5ACDF_4E(:,2) NMVOC_5ACDF_4E(:,3)...
  *NMVOC_IPCC_p(1,45)/(NMVOC_IPCC_p(1,41)+NMVOC_IPCC_p(1,43)+NMVOC_IPCC_p(1,44)...
  +NMVOC_IPCC_p(1,45))];
clear NMVOC_5ACDF_4E;

```

```

% Create the output array
NMVOC_emis = zeros(nx,ny,nsnap);

% Fill the output array for SNAP1
j = fix(round((NMVOC_1A1a(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_1A1a(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_1A1a(:,3);
NMVOC_emis(:,:,1) = tmp;
clear NMVOC_1A1a

j = fix(round((NMVOC_1A1bc(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_1A1bc(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_1A1bc(:,3);
NMVOC_emis(:,:,1) = NMVOC_emis(:,:,1) + tmp;
clear NMVOC_1A1bc

% Fill the output array for SNAP2
j = fix(round((NMVOC_1A4(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_1A4(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_1A4(:,3);
NMVOC_emis(:,:,2) = tmp;
clear NMVOC_1A4

% Fill the output array for SNAP3
j = fix(round((NMVOC_1A2(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_1A2(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_1A2(:,3);
NMVOC_emis(:,:,3) = tmp;
clear NMVOC_1A2

% Fill the output array for SNAP4
j = fix(round((NMVOC_2ABDE(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_2ABDE(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);

```

```

tmp(ind) = NMVOC_2ABDE(:,3);
NMVOC_emis(:, :, 4) = tmp;
clear NMVOC_2ABDE

j = fix(round((NMVOC_2C(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_2C(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_2C(:,3);
NMVOC_emis(:, :, 4) = NMVOC_emis(:, :, 4) + tmp;
clear NMVOC_2C

```

```

% Fill the output array for SNAP5
j = fix(round((NMVOC_1B(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_1B(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_1B(:,3);
NMVOC_emis(:, :, 5) = tmp;
clear NMVOC_1B

```

```

j = fix(round((NMVOC_7A(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_7A(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_7A(:,3);
NMVOC_emis(:, :, 5) = NMVOC_emis(:, :, 5) + tmp;
clear NMVOC_7A

```

```

% Fill the output array for SNAP6
j = fix(round((NMVOC_2FG(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_2FG(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_2FG(:,3);
NMVOC_emis(:, :, 6) = tmp;
clear NMVOC_2FG

```

```

j = fix(round((NMVOC_3(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_3(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_3(:,3);
NMVOC_emis(:, :, 6) = NMVOC_emis(:, :, 6) + tmp;
clear NMVOC_3

```

```
% Fill the output array for SNAP7
j = fix(round((NMVOC_1A3b(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_1A3b(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_1A3b(:,3);
NMVOC_emis(:,:,7) = tmp;
clear NMVOC_1A3b
```

```
% Fill the output array for SNAP8
j = fix(round((NMVOC_1A3acde(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_1A3acde(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_1A3acde(:,3);
NMVOC_emis(:,:,8) = tmp;
clear NMVOC_1A3acde
```

```
% Fill the output array for SNAP9
j = fix(round((NMVOC_6AC(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_6AC(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_6AC(:,3);
NMVOC_emis(:,:,9) = tmp;
clear NMVOC_6AC
```

```
% Fill the output array for SNAP10
j = fix(round((NMVOC_4F(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_4F(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_4F(:,3);
NMVOC_emis(:,:,10) = tmp;
clear NMVOC_4F
```

```
j = fix(round((NMVOC_5D(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NMVOC_5D(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NMVOC_5D(:,3);
NMVOC_emis(:,:,10) = NMVOC_emis(:,:,10) + tmp;
clear NMVOC_5D
```

```

clear tmp
clear i
clear j
clear ind
clear nsnap
clear numCol

% TXT File creation with Global NMVOC emission
% (1 / lon index / lat index / SNAP1 SNAP2 SNAP3 SNAP4 SNAP5 SNAP6 SNAP7
% SNAP8 SNAP9 SNAP10)
fid = fopen('NMVOC_totalSNAPs.txt', 'wt');
for i=1:ny
    for j=1:nx
        if (sum(NMVOC_emis(j,i,:)) > 0)
            fprintf(fid, '%4d %5d %5d %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g'...
                '%15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g\n',1,j,i,NMVOC_emis(j,i,:));
        end
    end
end
end
fclose(fid)

```

A.3 Conversión de NH₃ de sectores IPCC a SNAP

```

% Conversor de IPCC a SNAP para NH3
% datos de entrada: archivos TXT y CSV de EDGAR v4.2
% Fernanda Garcia
% 2013

clear all
close all

% Output grid parameters
dx = 0.1;
dy = 0.1;
xmin = -180;
xmax = 180;
ymin = -90;
ymax = 90;
x = xmin:dx:xmax;
y = ymin:dy:ymax;
nx = length(x);
ny = length(y);
nsnap = 10;

```

```
% Data dir, todos los archivos se encuentran en el mismo directorio
datadir = ['/home/data/EDGAR 4.2'];
```

```
% Read total IPCC
```

```
filename = [datadir filesep 'v4.2_NH3_2008.csv'];
NH3_IPCC_total = importdata(filename, ',', 11);
NH3_IPCC_total = NH3_IPCC_total.data;
```

```
% Read IPCC 1A1a_6
```

```
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_1A1a_6.txt'];
NH3_1A1a_6 = importdata(filename, ',', 3);
NH3_1A1a_6 = NH3_1A1a_6.data;
```

```
% Read IPCC 1A1b_c
```

```
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_1A1b_c.txt'];
NH3_1A1bc = importdata(filename, ',', 3);
NH3_1A1bc = NH3_1A1bc.data;
```

```
% Read IPCC 1A2
```

```
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_1A2.txt'];
NH3_1A2 = importdata(filename, ',', 3);
NH3_1A2 = NH3_1A2.data;
```

```
% Read IPCC 1A3
```

```
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_1A3.txt'];
NH3_1A3 = importdata(filename, ',', 3);
NH3_1A3 = NH3_1A3.data;
```

```
% Read IPCC 1A4
```

```
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_1A4.txt'];
NH3_1A4 = importdata(filename, ',', 3);
NH3_1A4 = NH3_1A4.data;
```

```
% Read IPCC 2A
```

```
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_2A.txt'];
NH3_2A = importdata(filename, ',', 3);
NH3_2A = NH3_2A.data;
```

```
% Read IPCC 2B
```

```
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_2B.txt'];
NH3_2B = importdata(filename, ',', 3);
NH3_2B = NH3_2B.data;
```

```
% Read IPCC 4B
```

```
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_4B.txt'];
NH3_4B = importdata(filename, ',', 3);
NH3_4B = NH3_4B.data;
```



```

% Read IPCC 4C D
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_4C_4D.txt'];
NH3_4CD = importdata(filename,',' ,3);
NH3_4CD = NH3_4CD.data;

% Read IPCC 4F
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_4F.txt'];
NH3_4F = importdata(filename,',' ,3);
NH3_4F = NH3_4F.data;

% Read IPCC 5A C D F 4E
filename = [datadir filesep 'v42_NH3_2008_IPCC_5A_C_D_F_4E.txt'];
NH3_5ACDF_4E = importdata(filename,',' ,3);
NH3_5ACDF_4E = NH3_5ACDF_4E.data;

clear datadir;
clear filename;

% NH3 IPCC partial
NH3_IPCC_p = NH3_IPCC_total(39,:)/NH3_IPCC_total(39,58);

% Transform IPCC 1A1a_6 --> 1A1a + 6C
NH3_1A1a = [NH3_1A1a_6(:,1) NH3_1A1a_6(:,2) NH3_1A1a_6(:,3)*NH3_IPCC_p(1,1)...
            /(NH3_IPCC_p(1,1)+NH3_IPCC_p(1,52))];
NH3_6C = [NH3_1A1a_6(:,1) NH3_1A1a_6(:,2) NH3_1A1a_6(:,3)*NH3_IPCC_p(1,52)...
            /(NH3_IPCC_p(1,1)+NH3_IPCC_p(1,52))];
clear NH3_1A1a_6;

% Transform IPCC 1A3 --> 1A3b + 1A3cde
NH3_1A3b = [NH3_1A3(:,1) NH3_1A3(:,2) NH3_1A3(:,3)*NH3_IPCC_p(1,5)/...
            (NH3_IPCC_p(1,5)+NH3_IPCC_p(1,6)+NH3_IPCC_p(1,7)+NH3_IPCC_p(1,8))];
NH3_1A3cde = [NH3_1A3(:,1) NH3_1A3(:,2) NH3_1A3(:,3)-NH3_1A3b(:,3)];
clear NH3_1A3;

% Transform IPCC 5A C D F 4E --> 5D
NH3_5D = [NH3_5ACDF_4E(:,1) NH3_5ACDF_4E(:,2) NH3_5ACDF_4E(:,3)*...
            NH3_IPCC_p(1,45)/(NH3_IPCC_p(1,41)+NH3_IPCC_p(1,43)+NH3_IPCC_p(1,44)...
            +NH3_IPCC_p(1,45))];
clear NH3_5ACDF_4E;

% Create the output array
NH3_emis = zeros(nx,ny,nsnap);

% Fill the output array for SNAP1

```

```

j = fix(round((NH3_1A1a(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_1A1a(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_1A1a(:,3);
NH3_emis(:,:,1) = tmp;
clear NH3_1A1a;

j = fix(round((NH3_1A1bc(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_1A1bc(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_1A1bc(:,3);
NH3_emis(:,:,1) = NH3_emis(:,:,1) + tmp;
clear NH3_1A1bc;

% Fill the output array for SNAP2
j = fix(round((NH3_1A4(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_1A4(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_1A4(:,3);
NH3_emis(:,:,2) = tmp;
clear NH3_1A4;

% Fill the output array for SNAP3
j = fix(round((NH3_1A2(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_1A2(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_1A2(:,3);
NH3_emis(:,:,3) = tmp;
clear NH3_1A2;

% Fill the output array for SNAP4
j = fix(round((NH3_2A(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_2A(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_2A(:,3);
NH3_emis(:,:,4) = tmp;
clear NH3_2A;

j = fix(round((NH3_2B(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_2B(:,2)-xmin)/dx + 1));

```

```
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_2B(:,3);
NH3_emis(:,:,4) = NH3_emis(:,:,4) + tmp;
clear NH3_2B;

% Fill the output array for SNAP5
% NO IPCC DATA TO TRANSFORM NH3 FROM IPCC TO SNAP 5.

% Fill the output array for SNAP6
% NO IPCC DATA TO TRANSFORM NH3 FROM IPCC TO SNAP 6.

% Fill the output array for SNAP7
j = fix(round((NH3_1A3b(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_1A3b(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_1A3b(:,3);
NH3_emis(:,:,7) = tmp;
clear NH3_1A3b;

% Fill the output array for SNAP8
j = fix(round((NH3_1A3cde(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_1A3cde(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_1A3cde(:,3);
NH3_emis(:,:,8) = tmp;
clear NH3_1A3cde;

% Fill the output array for SNAP9
j = fix(round((NH3_6C(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_6C(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_6C(:,3);
NH3_emis(:,:,8) = tmp;
clear NH3_6C;

% Fill the output array for SNAP10
j = fix(round((NH3_4B(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_4B(:,2)-xmin)/dx + 1));
```

```

tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_4B(:,3);
NH3_emis(:,:,10) = tmp;
clear NH3_4B;

j = fix(round((NH3_4CD(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_4CD(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_4CD(:,3);
NH3_emis(:,:,10) = NH3_emis(:,:,10) + tmp;
clear NH3_4CD;

j = fix(round((NH3_4F(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_4F(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_4F(:,3);
NH3_emis(:,:,10) = NH3_emis(:,:,10) + tmp;
clear NH3_4F;

j = fix(round((NH3_5D(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((NH3_5D(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = NH3_5D(:,3);
NH3_emis(:,:,10) = NH3_emis(:,:,10) + tmp;
clear NH3_5D;

clear tmp
clear i
clear j
clear ind

% TXT File creation with Global NH3 emission
% (1 / lon index / lat index / SNAP1 SNAP2 SNAP3 SNAP4 SNAP5 SNAP6 SNAP7
% SNAP8 SNAP9 SNAP10)

fid = fopen('NH3_totalSNAPs.txt', 'wt');
for i=1:ny
    for j=1:nx
        if (sum(NH3_emis(j,i,:)) > 0)
            fprintf(fid, '%4d %5d %5d %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g'...
                '%15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g\n',1,j,i,NH3_emis(j,i,:));
        end
    end
end
end

```

```
fclose(fid)
```

A.4 Conversión de SO₂ de sectores IPCC a SNAP

```
% Conversor de IPCC a SNAP para SO2
% datos de entrada: archivos TXT y CSV de EDGAR v4.2
% Fernanda Garcia
% 2013

clear all
close all

% Output grid parameters entire world
dx = 0.1;
dy = 0.1;
xmin = -180;
xmax = 180;
ymin = -90;
ymax = 90;
x = xmin:dx:xmax;
y = ymin:dy:ymax;
nx = length(x);
ny = length(y);
nsnap = 10;

% Data dir, todos los archivos se encuentran en el mismo directorio
datadir = ['/home/data/EDGAR 4.2'];

% Leer CSV con info de emisiones para cada sector IPCC
filename = [datadir filesep 'v4.2_S02_2008_2.csv'];
S02_IPCC_total = importdata(filename, ',', 11);
S02_IPCC_total = S02_IPCC_total.data;

% Read IPCC 1A1a 6C
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_1A1a_6C.txt'];
S02_1A1a_6C = importdata(filename, ',', 3);
S02_1A1a_6C = S02_1A1a_6C.data;

% Read IPCC 1A2
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_1A2.txt'];
S02_1A2 = importdata(filename, ',', 3);
S02_1A2 = S02_1A2.data;

% Read IPCC 1A3acde
```

```
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_1A3a_c_d_e.txt'];
S02_1A3acde = importdata(filename,',' ,3);
S02_1A3acde = S02_1A3acde.data;

% Read IPCC 1A3b
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_1A3b.txt'];
S02_1A3b = importdata(filename,',' ,3);
S02_1A3b = S02_1A3b.data;

% Read IPCC 1A4
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_1A4.txt'];
S02_1A4 = importdata(filename,',' ,3);
S02_1A4 = S02_1A4.data;

% Read IPCC 1B2ac 1A1bc
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_1B1_1B2_1A1b_c.txt'];
S02_1B1_1B2_1A1bc = importdata(filename,',' ,3);
S02_1B1_1B2_1A1bc = S02_1B1_1B2_1A1bc.data;

% Read IPCC 2BD
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_2B_2D.txt'];
S02_2BD = importdata(filename,',' ,3);
S02_2BD = S02_2BD.data;

% Read IPCC 2C
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_2C.txt'];
S02_2C = importdata(filename,',' ,3);
S02_2C = S02_2C.data;

% Read IPCC 4F
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_4F.txt'];
S02_4F = importdata(filename,',' ,3);
S02_4F = S02_4F.data;

% Read IPCC 5A 5C 5D 5F 4E
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_5A_C_D_F_4E.txt'];
S02_5ACDF_4E = importdata(filename,',' ,3);
S02_5ACDF_4E = S02_5ACDF_4E.data;

% Read IPCC 7A
filename = [datadir filesep 'v42_S02_2008_IPCC_7A.txt'];
S02_7A = importdata(filename,',' ,3);
S02_7A = S02_7A.data;

clear datadir;
clear filename;

% S02 IPCC partial
```

```

S02_IPCC_p = S02_IPCC_total(39,:)/S02_IPCC_total(39,58);

% Transform IPCC 1A1a_6C --> 1A1a + 6C
S02_1A1a = [S02_1A1a_6C(:,1) S02_1A1a_6C(:,2) S02_1A1a_6C(:,3)*S02_IPCC_p(1,1)...
            /(S02_IPCC_p(1,1)+S02_IPCC_p(1,52))];
S02_6C = [S02_1A1a_6C(:,1) S02_1A1a_6C(:,2) S02_1A1a_6C(:,3)-S02_1A1a(:,3)];
clear S02_1A1a_6C;

% Transform IPCC 1B1_1B2_1A1bc --> 1B1_1B2 + 1A1bc
S02_1A1bc = [S02_1B1_1B2_1A1bc(:,1) S02_1B1_1B2_1A1bc(:,2) S02_1B1_1B2_1A1bc(:,3)...
            *S02_IPCC_p(1,2)/(S02_IPCC_p(1,2)+S02_IPCC_p(1,10)+S02_IPCC_p(1,11))];
S02_1B1_1B2 = [S02_1B1_1B2_1A1bc(:,1) S02_1B1_1B2_1A1bc(:,2) S02_1B1_1B2_1A1bc(:,3)...
            -S02_1A1bc(:,3)];
clear S02_1B1_1B2_1A1bc;

% % Transform IPCC 5A C D F 4E --> 5D
S02_5D = [S02_5ACDF_4E(:,1) S02_5ACDF_4E(:,2) S02_5ACDF_4E(:,3)*S02_IPCC_p(1,45)...
            /(S02_IPCC_p(1,41)+S02_IPCC_p(1,42)+S02_IPCC_p(1,43)+S02_IPCC_p(1,44)+S02_IPCC_p(1,45))];
clear S02_5ACDF_4E;

% Create the output array
S02_emis = zeros(nx,ny,nsnap);

% Fill the output array for SNAP1
j = fix(round((S02_1A1a(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_1A1a(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_1A1a(:,3);
S02_emis(:,:,1) = tmp;
clear S02_1A1a;

j = fix(round((S02_1A1bc(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_1A1bc(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_1A1bc(:,3);
S02_emis(:,:,1) = S02_emis(:,:,1) + tmp;
clear S02_1A1bc;

% Fill the output array for SNAP2
j = fix(round((S02_1A4(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_1A4(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_1A4(:,3);
S02_emis(:,:,2) = tmp;

```

```
clear S02_1A4;

% Fill the output array for SNAP3
j = fix(round((S02_1A2(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_1A2(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_1A2(:,3);
S02_emis(:, :, 3) = tmp;
clear S02_1A2;

% Fill the output array for SNAP4
j = fix(round((S02_2BD(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_2BD(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_2BD(:,3);
S02_emis(:, :, 4) = tmp;
clear S02_2BD;

j = fix(round((S02_2C(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_2C(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_2C(:,3);
S02_emis(:, :, 4) = S02_emis(:, :, 4) + tmp;
clear S02_2C;

% Fill the output array for SNAP5
j = fix(round((S02_1B1_1B2(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_1B1_1B2(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_1B1_1B2(:,3);
S02_emis(:, :, 5) = tmp;
clear S02_1B1_1B2;

j = fix(round((S02_7A(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_7A(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_7A(:,3);
S02_emis(:, :, 5) = S02_emis(:, :, 5) + tmp;
clear S02_7A;

% Fill the output array for SNAP6
% NO IPCC DATA TO TRANSFORM SO2 FROM IPCC TO SNAP 6.
```



```
% Fill the output array for SNAP7
j = fix(round((S02_1A3b(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_1A3b(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_1A3b(:,3);
S02_emis(:,:,7) = tmp;
clear S02_1A3b;

% Fill the output array for SNAP8
j = fix(round((S02_1A3acde(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_1A3acde(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_1A3acde(:,3);
S02_emis(:,:,8) = tmp;
clear S02_1A3acde;

% Fill the output array for SNAP9
j = fix(round((S02_6C(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_6C(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_6C(:,3);
S02_emis(:,:,9) = tmp;
clear S02_6C;

% Fill the output array for SNAP10
j = fix(round((S02_4F(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_4F(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_4F(:,3);
S02_emis(:,:,10) = tmp;
clear S02_4F;

j = fix(round((S02_5D(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((S02_5D(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = S02_5D(:,3);
S02_emis(:,:,10) = S02_emis(:,:,10) + tmp;
clear S02_5D;

clear tmp
clear i
clear j
```

```

clear ind

% TXT File creation with Global SO2 emission
% (1 / lon index / lat index / SNAP1 SNAP2 SNAP3 SNAP4 SNAP5 SNAP6 SNAP7
% SNAP8 SNAP9 SNAP10)
fid = fopen('S02_totalSNAPs.txt', 'wt');
for i=1:ny
    for j=1:nx
        if (sum(SO2_emis(j,i,:)) > 0)
            fprintf(fid, '%4d %5d %5d %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g'...
                '%15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g\n',1,j,i,SO2_emis(j,i,:));
        end
    end
end
fclose(fid);

```

A.5 Conversión de CO de sectores IPCC a SNAP

```

% Conversor de IPCC a SNAP para CO
% datos de entrada: archivos TXT y CSV de EDGAR v4.2
% Fernanda Garcia
% 2013

clear all
close all

% Output grid parameters
dx = 0.1;
dy = 0.1;
xmin = -180;
xmax = 180;
ymin = -90;
ymax = 90;
x = xmin:dx:xmax;
y = ymin:dy:ymax;
nx = length(x);
ny = length(y);
nsnap = 10;

% Data dir, todos los archivos se encuentran en el mismo directorio
datadir = ['/home/data/EDGAR 4.2'];

% Leer CSV con info de emisiones para cada sector IPCC
filename = [datadir filesep 'v4.2_CO_2008.csv'];

```

```
CO_IPCC_total = importdata(filename, ',', 11);
CO_IPCC_total = CO_IPCC_total.data;

% Read IPCC 1A1a_6
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_1A1a_6.txt'];
CO_1A1a_6 = importdata(filename, ',', 3);
CO_1A1a_6 = CO_1A1a_6.data;

% Read IPCC 1A2 --> SNAP3
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_1A2.txt'];
CO_1A2 = importdata(filename, ',', 3);
CO_1A2 = CO_1A2.data;

% Read IPCC 1A3acde
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_1A3a_c_d_e.txt'];
CO_1A3acde = importdata(filename, ',', 3);
CO_1A3acde = CO_1A3acde.data;

% Read IPCC 1A3b
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_1A3b.txt'];
CO_1A3b = importdata(filename, ',', 3);
CO_1A3b = CO_1A3b.data;

% Read IPCC 1A4 --> SNAP2
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_1A4.txt'];
CO_1A4 = importdata(filename, ',', 3);
CO_1A4 = CO_1A4.data;

% Read IPCC 1B2a_c_1A1b_c
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_1B2a_c_1A1b_c.txt'];
CO_1B2ac_1A1bc = importdata(filename, ',', 3);
CO_1B2ac_1A1bc = CO_1B2ac_1A1bc.data;

% Read IPCC 2A 2B 2D
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_2A_2B_2D.txt'];
CO_2ABD = importdata(filename, ',', 3);
CO_2ABD = CO_2ABD.data;

% Read IPCC 2C
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_2C.txt'];
CO_2C = importdata(filename, ',', 3);
CO_2C = CO_2C.data;

% Read IPCC 4F
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_4F.txt'];
CO_4F = importdata(filename, ',', 3);
CO_4F = CO_4F.data;
```

```

% Read IPCC 5A C D F 4E
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_5A_C_D_F_4E.txt'];
CO_5ACDF_4E = importdata(filename,',' ,3);
CO_5ACDF_4E = CO_5ACDF_4E.data;

% Read IPCC 7A
filename = [datadir filesep 'v42_CO_2008_IPCC_7A.txt'];
CO_7A = importdata(filename,',' ,3);
CO_7A = CO_7A.data;

clear datadir;
clear filename;

% CO IPCC partial for Argentina
CO_IPCC_p = CO_IPCC_total(39,:)/CO_IPCC_total(39,58);

% Transform IPCC 1A1a_6 --> 1A1a + 6C
CO_1A1a = [CO_1A1a_6(:,1) CO_1A1a_6(:,2) CO_1A1a_6(:,3)*CO_IPCC_p(1,1)/...
           (CO_IPCC_p(1,1)+CO_IPCC_p(1,52))];
CO_6C = [CO_1A1a_6(:,1) CO_1A1a_6(:,2) CO_1A1a_6(:,3)*CO_IPCC_p(1,52)/...
          (CO_IPCC_p(1,1)+CO_IPCC_p(1,52))];
clear CO_1A1a_6;

% Transform IPCC 1B2a_c_1A1b_c --> 1A1bc + 1B2ac
CO_1A1bc = [CO_1B2ac_1A1bc(:,1) CO_1B2ac_1A1bc(:,2) CO_1B2ac_1A1bc(:,3)*...
            CO_IPCC_p(1,2)/(CO_IPCC_p(1,2)+CO_IPCC_p(1,11))];
CO_1B2ac = [CO_1B2ac_1A1bc(:,1) CO_1B2ac_1A1bc(:,2) CO_1B2ac_1A1bc(:,3)*...
            CO_IPCC_p(1,11)/(CO_IPCC_p(1,2)+CO_IPCC_p(1,11))];
clear CO_1B2ac_1A1bc;

% Transform IPCC 5ACDF_4E --> 5AC
CO_5AC = [CO_5ACDF_4E(:,1) CO_5ACDF_4E(:,2) CO_5ACDF_4E(:,3)*(CO_IPCC_p(1,43)...
           +CO_IPCC_p(1,44))/(CO_IPCC_p(1,41)+CO_IPCC_p(1,43)+CO_IPCC_p(1,44)+...
           CO_IPCC_p(1,45))];
clear CO_5ACDF_4E;

% Create the output array
CO_emis = zeros(nx,ny,nsnap);

% Fill the output array for SNAP1
j = fix(round((CO_1A1a(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_1A1a(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_1A1a(:,3);
CO_emis(:,:,1) = tmp;

```

```

clear CO_1A1a;

j = fix(round((CO_1A1bc(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_1A1bc(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_1A1bc(:,3);
CO_emis(:,:,1) = CO_emis(:,:,1) + tmp;
clear CO_1A1bc;

% Fill the output array for SNAP2
j = fix(round((CO_1A4(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_1A4(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_1A4(:,3);
CO_emis(:,:,2) = tmp;
clear CO_1A4;

% Fill the output array for SNAP3
j = fix(round((CO_1A2(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_1A2(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_1A2(:,3);
CO_emis(:,:,3) = tmp;
clear CO_1A2;

% % Fill the output array for SNAP4
j = fix(round((CO_2ABD(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_2ABD(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_2ABD(:,3);
CO_emis(:,:,4) = tmp;
clear CO_2ABD;

j = fix(round((CO_2C(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_2C(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_2C(:,3);
CO_emis(:,:,4) = CO_emis(:,:,4) + tmp;
clear CO_2C;

```

```
% Fill the output array for SNAP5
j = fix(round((CO_1B2ac(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_1B2ac(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_1B2ac(:,3);
CO_emis(:,:,5) = tmp;
clear CO_1B2ac;

j = fix(round((CO_7A(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_7A(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_7A(:,3);
CO_emis(:,:,5) = CO_emis(:,:,5) + tmp;
clear CO_7A;

% Fill the output array for SNAP6
% NO IPCC DATA TO TRANSFORM CO FROM IPCC TO SNAP 6.

% Fill the output array for SNAP7
j = fix(round((CO_1A3b(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_1A3b(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_1A3b(:,3);
CO_emis(:,:,7) = tmp;
clear CO_1A3b;

% % Fill the output array for SNAP8
j = fix(round((CO_1A3acde(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_1A3acde(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_1A3acde(:,3);
CO_emis(:,:,8) = tmp;
clear CO_1A3acde;

% Fill the output array for SNAP9
j = fix(round((CO_6C(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_6C(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_6C(:,3);
```

```

CO_emis(:,:,9) = tmp;
clear CO_6C;

% Fill the output array for SNAP10
j = fix(round((CO_4F(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_4F(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_4F(:,3);
CO_emis(:,:,10) = tmp;
clear CO_4F;

j = fix(round((CO_5AC(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((CO_5AC(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = CO_5AC(:,3);
CO_emis(:,:,10) = CO_emis(:,:,10) + tmp;
clear CO_5AC;

clear tmp
clear i
clear j
clear ind
clear nsnap
clear numCol

% TXT File creation with Global CO emission
% (1 / lon index / lat index / SNAP1 SNAP2 SNAP3 SNAP4 SNAP5 SNAP6 SNAP7
% SNAP8 SNAP9 SNAP10)

fid = fopen('CO_totalSNAPs.txt', 'wt');
for i=1:ny
    for j=1:nx
        if (sum(CO_emis(j,i,:)) > 0)
            fprintf(fid, '%4d %5d %5d %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g'...
                '%15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g\n',1,j,i,CO_emis(j,i,:));
        end
    end
end
end
fclose(fid)

```

A.6 Conversión de PM10 de sectores IPCC a SNAP

```
% Conversor de IPCC a SNAP para PM10
% datos de entrada: archivos TXT y CSV de EDGAR v4.2
% Fernanda Garcia
% 2013

clear all
close all

% Output grid parameters
dx = 0.1;
dy = 0.1;
xmin = -180;
xmax = 180;
ymin = -90;
ymax = 90;
x = xmin:dx:xmax;
y = ymin:dy:ymax;
nx = length(x);
ny = length(y);
nsnap = 10;

% Data dir, todos los archivos se encuentran en el mismo directorio
datadir = ['/home/data/EDGAR 4.2'];

% Leer CSV con info de emisiones para cada sector IPCC
filename = [datadir filesep 'v4.2_PM10_2008.csv'];
PM10_IPCC_total = importdata(filename, ',', 11);
PM10_IPCC_total = PM10_IPCC_total.data;

% Read IPCC 1A1a
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_1A1a.txt'];
PM10_1A1a = importdata(filename, ',', 3);
PM10_1A1a = PM10_1A1a.data;

% Read IPCC 1A2
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_1A2.txt'];
PM10_1A2 = importdata(filename, ',', 3);
PM10_1A2 = PM10_1A2.data;

% Read IPCC 1A3acde
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_1A3a_c_d_e.txt'];
PM10_1A3acde = importdata(filename, ',', 3);
PM10_1A3acde = PM10_1A3acde.data;

% Read IPCC 1A3b
```



```
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_1A3b.txt'];
PM10_1A3b = importdata(filename, ',', 3);
PM10_1A3b = PM10_1A3b.data;

% Read IPCC 1A4
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_1A4.txt'];
PM10_1A4 = importdata(filename, ',', 3);
PM10_1A4 = PM10_1A4.data;

% Read IPCC 1B2ac 1A1bc
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_1B2a_c_1A1b_c.txt'];
PM10_1B2ac_1A1bc = importdata(filename, ',', 3);
PM10_1B2ac_1A1bc = PM10_1B2ac_1A1bc.data;

% Read IPCC 2 3
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_2_3.txt'];
PM10_2_3 = importdata(filename, ',', 3);
PM10_2_3 = PM10_2_3.data;

% Read IPCC 4B
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_4B.txt'];
PM10_4B = importdata(filename, ',', 3);
PM10_4B = PM10_4B.data;

% Read IPCC 4C 4D
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_4C_4D.txt'];
PM10_4CD = importdata(filename, ',', 3);
PM10_4CD = PM10_4CD.data;

% Read IPCC 4F
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_4F.txt'];
PM10_4F = importdata(filename, ',', 3);
PM10_4F = PM10_4F.data;

% Read IPCC 5A C D F 4E
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_5A_C_D_F_4E.txt'];
PM10_5ACDF_4E = importdata(filename, ',', 3);
PM10_5ACDF_4E = PM10_5ACDF_4E.data;

% Read IPCC 6A 6C
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_6A_6C.txt'];
PM10_6AC = importdata(filename, ',', 3);
PM10_6AC = PM10_6AC.data;

% Read IPCC 7A
filename = [datadir filesep 'v42_PM10_2008_IPCC_7A.txt'];
PM10_7A = importdata(filename, ',', 3);
PM10_7A = PM10_7A.data;
```

```

clear datadir
clear filename

% PM10 IPCC partial
PM10_IPCC_p = PM10_IPCC_total(39,:)/PM10_IPCC_total(39,58);

% Transform IPCC 1B2ac_1A1bc --> 1A1bc + 1B2
PM10_1A1bc = [PM10_1B2ac_1A1bc(:,1) PM10_1B2ac_1A1bc(:,2) PM10_1B2ac_1A1bc(:,3)...
    *PM10_IPCC_p(1,2)/(PM10_IPCC_p(1,2)+PM10_IPCC_p(1,11))];
PM10_1B2 = [PM10_1B2ac_1A1bc(:,1) PM10_1B2ac_1A1bc(:,2) PM10_1B2ac_1A1bc(:,3)...
    -PM10_1A1bc(:,3)];
clear PM10_1B2ac_1A1bc;

% Transform IPCC 2_3 --> 3B + 2A B C
PM10_3B = [PM10_2_3(:,1) PM10_2_3(:,2) PM10_2_3(:,3)*PM10_IPCC_p(1,31)/...
    sum(PM10_IPCC_p(1,14:33))];
PM10_2A_B_C = [PM10_2_3(:,1) PM10_2_3(:,2) PM10_2_3(:,3)-(PM10_2_3(:,3)*...
    sum(PM10_IPCC_p(1,19:33))/sum(PM10_IPCC_p(1,14:33)))]];
clear PM10_2_3

% Create the output array
PM10_emis = zeros(nx,ny,nsnap);

% Fill the output array for SNAP1
j = fix(round((PM10_1A1a(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_1A1a(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_1A1a(:,3);
PM10_emis(:,:,1) = tmp;
clear PM10_1A1a

j = fix(round((PM10_1A1bc(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_1A1bc(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_1A1bc(:,3);
PM10_emis(:,:,1) = PM10_emis(:,:,1) + tmp;
clear PM10_1A1bc

% Fill the output array for SNAP2
j = fix(round((PM10_1A4(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_1A4(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);

```

```
tmp(ind) = PM10_1A4(:,3);
PM10_emis(:, :, 2) = tmp;
clear PM10_1A4

% Fill the output array for SNAP3
j = fix(round((PM10_1A2(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_1A2(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_1A2(:,3);
PM10_emis(:, :, 3) = tmp;
clear PM10_1A2

% Fill the output array for SNAP4
j = fix(round((PM10_2A_B_C(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_2A_B_C(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_2A_B_C(:,3);
PM10_emis(:, :, 4) = tmp;
clear PM10_2A_B_C

% Fill the output array for SNAP5
j = fix(round((PM10_1B2(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_1B2(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_1B2(:,3);
PM10_emis(:, :, 5) = tmp;
clear PM10_1B2

j = fix(round((PM10_7A(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_7A(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_7A(:,3);
PM10_emis(:, :, 5) = PM10_emis(:, :, 5) + tmp;
clear PM10_7A

% Fill the output array for SNAP6
j = fix(round((PM10_3B(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_3B(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_3B(:,3);
```

```

PM10_emis(:,:,6) = tmp;
clear PM10_3B

% Fill the output array for SNAP7
j = fix(round((PM10_1A3b(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_1A3b(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_1A3b(:,3);
PM10_emis(:,:,7) = tmp;
clear PM10_1A3b

% Fill the output array for SNAP8
j = fix(round((PM10_1A3acde(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_1A3acde(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_1A3acde(:,3);
PM10_emis(:,:,8) = tmp;
clear PM10_1A3acde

% Fill the output array for SNAP9
j = fix(round((PM10_6AC(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_6AC(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_6AC(:,3);
PM10_emis(:,:,9) = tmp;
clear PM10_6AC

% Fill the output array for SNAP10
j = fix(round((PM10_4B(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_4B(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_4B(:,3);
PM10_emis(:,:,10) = tmp;
clear PM10_4B

j = fix(round((PM10_4CD(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_4CD(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_4CD(:,3);
PM10_emis(:,:,10) = PM10_emis(:,:,10) + tmp;

```

```

clear PM10_4CD

j = fix(round((PM10_4F(:,1)-ymin)/dy + 1));
i = fix(round((PM10_4F(:,2)-xmin)/dx + 1));
tmp = zeros(nx,ny);
ind = sub2ind(size(tmp),i,j);
tmp(ind) = PM10_4F(:,3);
PM10_emis(:,:,10) = PM10_emis(:,:,10) + tmp;
clear PM10_4F

clear tmp
clear i
clear j
clear ind
clear PM10_5ACDF_4E
clear PM10_IPCC_total
clear datadir
clear filename
clear numCol

% TXT File creation with Global PM10 emission
% (1 / lon index / lat index / SNAP1 SNAP2 SNAP3 SNAP4 SNAP5 SNAP6 SNAP7
% SNAP8 SNAP9 SNAP10)
fid = fopen('PM10_totalSNAPs.txt', 'wt');
for i=1:ny
    for j=1:nx
        if (sum(PM10_emis(j,i,:)) > 0)
            fprintf(fid, '%4d %5d %5d %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g'...
                '%15.5g %15.5g %15.5g %15.5g %15.5g\n',1,j,i,PM10_emis(j,i,:));
        end
    end
end
end
fclose(fid);

```

Apéndice B

Apéndice B: Nuevo Código para emiSURF

```
#!/bin/sh
unset LANG

# outype=0 one file per month, outype=1, one file per month and per species
outype=1
# Digit number for shipping emissions (default=2;3 could be available, check before!!)
shipping=2
# Output species, outputspecies=metals, nometals
outputspecies=nometals

# pdir is the current directory (enter manually the complete path)
export pdir='pwd'
# where is the chimere model? (we need its makefiles)
export chimeredir=/home/chimere/chimere2011a+
# where do you take land use (netcdf) files ?
export bigfiles=/data/chimere/BIGFILES2011
# what is your chimere domain for these emissions?
export dom=CONT5
# Years to simulate
listyears="2008"
# where do you want the results
export outdir=${bigfiles}/EMI
# possible sources: LA (free), EMEP (free), TNO (not free, not provided)
# Added EDGAR (gc, 12/2/13)
#list_sources="LA EMEP05x05"
list_sources="EDGAR01x01"
# Reggridding landuse : possible Land Use sources: glcf or globcover
lu_source="glcf"
```

```

#####
# end of user options
#####

[ -d "${bigfiles}" ] || { echo "**** BIGFILES directory not found. Check\
'bigfiles' parameter in emis-surf.sh" ; exit 1 ; }

case ${lu_source} in
    glcf)
        lu=${bigfiles}/glcf_freshwater.nc
        ;;
    globcover)
        lu=${bigfiles}/globcover_freshwater.nc
        ;;
    *)
        echo "Unknown landuse: ${lu_source}"; exit 1
esac

[ -s "${lu}" ] || { echo "**** Land use file ${lu} not found. Check 'bigfiles'\
parameter in emis-surf.sh" ; exit 1 ; }

#-----
if [ ${outype} == "0" ] ; then
    \cp ${pdir}/src/sectoremis_allspec.F90 ${pdir}/src/sectoremis.F90
fi
if [ ${outype} == "1" ] ; then
    \cp ${pdir}/src/sectoremis_onespec.F90 ${pdir}/src/sectoremis.F90
fi
#-----

#-----
echo "Creating correct compilation makefile..."
[ -f ${chimeredir}/mychimere.sh ] || { echo "${chimeredir}/mychimere.sh not found.\
Bye." ; exit 1; }
source ${chimeredir}/mychimere.sh
rm -f Makefile.hdr
ln -s ${chimeredir}/makefiles.hdr/${my_hdr} Makefile.hdr
make clean
make || { echo '*** make failed!' ; exit 1; }
#-----

echo "-----"
echo " "
echo "    emiSURF CHIMERE EMISSIONS PRE-PROCESSOR"
echo " "
echo "    contact : chimere@lmd.polytechnique.fr "
echo "    Last update : July 2011 "

```

```
echo " "
echo "-----"

# end of users parameters
emissurf_tmp=tmp$$
mkdir -p ${emissurf_tmp}

export domainsdir=${chimeredir}/domains

export coord_EMEP=${pdir}/inputdata/COORD_EMEP
export coord_EMEP10x10=${pdir}/inputdata/COORD_EMEP10x10
export coord_EMEP10km=${pdir}/inputdata/COORD_EMEP10km

# TNO input data
nzonalTNO=280
nmeridTNO=140

# EMEP input data
nzonaleMEP=135
nmeridEMEP=122
nzonaleMEP10x10=601
nmeridEMEP10x10=471
nzonaleMEP05x05=180
nmeridEMEP05x05=90
nzonaleMEP10km=660
nmeridEMEP10km=555

# Laboratoire d'Aerologie input data
nzonalLA=200
nmeridLA=140

#-----

tmpdir=${pdir}/tmploc-$$
\cp -R ${domainsdir} ${tmpdir}
cd ${tmpdir}

export coordfile=${tmpdir}/HCOORD/COORD_${dom}
export landuse_file=${tmpdir}/HCOORD/COORD_${dom}

if [ -e ${coordfile} ] ; then
    echo "    Domain coordinate file already existing:"
    echo ${coordfile}
fi
if [ ! -e ${coordfile} ] ; then
echo "Create ${coordfile} file..."
    ./makeCOORDdomains.sh ${dom} || { echo "makeCOORDdomains.sh failure"; exit 1; }
fi
```



```

echo "estimation of domain size"
nzonal='gawk 'BEGIN{stop=0}{x[FNR]=$1}END{for(k=2;k<=FNR;k++) {if(x[k-1]>x[k]&&stop==0)\
{print k-1;stop=1}}}' ${coordfile}'
ntotal='wc -l  ${coordfile} | gawk '{print $1}' '
nmerid='expr ${ntotal} /  ${nzonal}'
echo $nzonal x $nmerid

echo "going to "$pdir
cd $pdir

# Compute time shifting
echo "-----"
echo "Calculate time shifting..."
\cp inputdata/*.data          ${emissurf_tmp}
\cp src/timeshift.e           ${emissurf_tmp}
\cp src/calcorners.e          ${emissurf_tmp}
cd ${emissurf_tmp}

echo "  timezone calculations"
echo ${nzonal}                > ts.par
echo ${nmerid}                >> ts.par
echo ${coordfile}             >> ts.par
echo ${nzonaleMEP}            >> ts.par
echo ${nmeridEMEP}            >> ts.par
echo ${coord_EMEP}            >> ts.par
echo COUNTRIES-LIST.data      >> ts.par
echo emep50gridfract.data     >> ts.par
echo SHIFT-TIME.data          >> ts.par
./timeshift.e || { echo "timeshift.e failure"; exit 1; }
echo "    created file: SHIFT-TIME.data"
\mv SHIFT-TIME.data  ${pdir}/inputdata

echo "-----"
echo "Corners calculations..."
echo ${nzonal}                > calcorners.par
echo ${nmerid}                >> calcorners.par
echo ${coordfile}             >> calcorners.par
echo ${dom}_GRID_CORNERS.data >> calcorners.par
./calcorners.e || { echo "calcorners.e failure"; exit 1; }
echo "    created file: ${dom}_GRID_CORNERS.data"
\mv  ${dom}_GRID_CORNERS.data  ${pdir}/inputdata

cd ${pdir}
rm -rf ${emissurf_tmp}

#-----

```

```

echo "Reading parameters lists"
echo ".. now in "${pdir}"

list_spec=${pdir}/inputdata/listallspecies
touch ${list_spec} .tmp
\rm ${list_spec} .tmp

# Added EDGAR (gc, 12/2/13)
make_edgar=0
for sources in $list_sources ; do
  if [ ${sources} == "LA" ] ; then
    gawk '{printf("%s %s \n",$1," LA") >> ".tmp" }' ${pdir}/inputdata\
      /SPECIES_LA.data
  fi
  if [ ${sources} == "EMEP10x10" ] ; then
    gawk '{printf("%s %s \n",$1," EMEP10x10") >> ".tmp" }' ${pdir}/inputdata\
      /SPECIES_EMEP10x10.data
  fi
  if [ ${sources} == "EMEP05x05" ] ; then
    gawk '{printf("%s %s \n",$1," EMEP05x05") >> ".tmp" }' ${pdir}/inputdata\
      /SPECIES_EMEP05x05.data
  fi
  if [ ${sources} == "EMEP" ] ; then
    gawk '{printf("%s %s \n",$1," EMEP") >> ".tmp" }' ${pdir}/inputdata\
      /SPECIES_EMEP.data
  fi
  if [ ${sources} == "TNO" ] ; then
    gawk '{printf("%s %s \n",$1," TNO") >> ".tmp" }' ${pdir}/inputdata\
      /SPECIES_TNO.data
  fi
  # Added EDGAR (gc, 12/2/13)
  if [ ${sources} == "EDGAR01x01" ] ; then
    gawk '{printf("%s %s \n",$1," EDGAR01x01") >> ".tmp" }' ${pdir}/inputdata\
      /SPECIES_EDGAR01x01.data
    make_edgar=1
  fi
done

npoltot='wc -l .tmp | gawk '{print $1}''

echo "Species to treat:"
mv .tmp ${list_spec}
cat ${list_spec}

#-----
# EDGAR pre-processing

```

```

if [ $make_edgar -gt 0 ] ; then
  speclist='awk '{print $1}' ${list_spec}'
  datadir=${pdir}/annual-EDGAR01x01
  cwd='pwd'
  cd ${datadir}/grid
  cp ${pdir}/Makefile.hdr .
  make

  # Cut emissions over output domain
  xmin='head -n 1 $coordfile | awk '{print $1}' -'
  xmax='tail -n 1 $coordfile | awk '{print $1}' -'
  ymin='head -n 1 $coordfile | awk '{print $2}' -'
  ymax='tail -n 1 $coordfile | awk '{print $2}' -'
  xmin=$(bc <<< "scale=4; $xmin - 1")
  xmax=$(bc <<< "scale=4; $xmax + 1")
  ymin=$(bc <<< "scale=4; $ymin - 1")
  ymax=$(bc <<< "scale=4; $ymax + 1")
  echo "Crop EDGAR emissions [$xmin - $xmax; $ymin - $ymax] ..."

  mkdir -p ${pdir}/annual-EDGAR01x01/${dom}
  for spec in $speclist ; do
    for year in $listyears ; do

      echo ${datadir}           >  croppedgar.par
      echo ${dom}               >> croppedgar.par
      echo ${spec}              >> croppedgar.par
      echo ${year}              >> croppedgar.par
      echo ${xmin}              >> croppedgar.par
      echo ${xmax}              >> croppedgar.par
      echo ${ymin}              >> croppedgar.par
      echo ${ymax}              >> croppedgar.par

      ./croppedgar.e || { echo "croppedgar.e failure"; exit 1; }
      echo "    created file: ${datadir}/${dom}/${spec}_${year}"
      ln -sf ${datadir}/${dom}/${spec}_${year} ${datadir}/${spec}_${year}

    done
  done

  done

  echo "Corners calculations..."
  nzonedEDGAR01x01='cat ${datadir}/${dom}/NGRID_EDGAR01x01 | awk '{print $1}' -'
  nmeridEDGAR01x01='cat ${datadir}/${dom}/NGRID_EDGAR01x01 | awk '{print $2}' -'
  echo ${nzonedEDGAR01x01}           >  calcorners.par
  echo ${nmeridEDGAR01x01}          >> calcorners.par
  echo ${datadir}/${dom}/COORD_EDGAR01x01 >> calcorners.par
  echo EDGAR01x01_GRID_CORNERS.data    >> calcorners.par
  ./calcorners.e || { echo "calcorners.e failure"; exit 1; }
  ./lonlat2surf.e || { echo "lonlat2surf.e failure"; exit 1; }
  mv EDGAR01x01_GRID_CORNERS.dataNEW EDGAR01x01_GRID_CORNERS.data

```

```

mv EDGAR01x01_GRID_CORNERS.data ${datadir}/${dom}
echo "    created file: EDGAR01x01_GRID_CORNERS.data"
\cp ${datadir}/${dom}/EDGAR01x01_GRID_CORNERS.data  ${pdir}/inputdata
\cp ${datadir}/${dom}/COORD_EDGAR01x01  ${pdir}/inputdata/SHIFT-TIME.data

cd $cwd

fi

#-----
if [ ! -d $dom ] ; then
    mkdir -p $dom
fi
\rm -r $dom-tmp
echo "Create temporary work directory: "$dom-tmp
mkdir -p $dom-tmp
wait

\cp src/source2chimere.e      $dom-tmp
\cp src/sectoremis.e         $dom-tmp
cd $dom-tmp
echo ".. now in "$dom-tmp
wait
#-----
for i in $listyears ; do

echo "creating output directory: "${outdir}/EMI_${i}
mkdir -p ${outdir}
mkdir -p ${outdir}/EMI_${i}

for sources in $list_sources ; do

export rawdatadir=${pdir}/annual-${sources}

npol='wc -l ${pdir}/inputdata/SPECIES_${sources}.data | gawk '{print $1}''
nspecm='gawk '{if(FNR==1)print NF-14}' ${pdir}/inputdata/AGGREGATION.${outputspecies}'
nagg='wc -l ${pdir}/inputdata/AGGREGATION.${outputspecies} | gawk '{print $1}''
nspecr='expr ${nagg} - 3'

echo "=====
echo "Working for ${sources} emissions data "
echo "-----"

echo "  Number of pollutants to treat: " ${npol}

eval nxin=\$nzonal${sources}
eval nyin=\$nmerid${sources}

```

```

echo " Raw domain size: " "${nxin}" x "${nyin}"
\rm s2par.par
echo " Preparation of infos distrib parameters"
    echo ${dom} > s2par.par
    echo ${sources} >> s2par.par
    echo ${rawdatadir} >> s2par.par
    echo ${pdir}/inputdata/SEASONAL-FACS >> s2par.par
    echo ${pdir}/inputdata/WEEKLY-FACS >> s2par.par
    echo ${pdir}/inputdata/${sources}_GRID_CORNERS.data >> s2par.par
    echo ${pdir}/inputdata/${dom}_GRID_CORNERS.data >> s2par.par
    echo ${lu} >> s2par.par
    echo ${pdir}/inputdata/SPECIES_${sources}.data >> s2par.par
    echo ${i} >> s2par.par
    echo ${nxin} >> s2par.par
    echo ${nyin} >> s2par.par
    echo ${nzonal} >> s2par.par
    echo ${nmerid} >> s2par.par
    echo ${npol} >> s2par.par
    echo ${nspecm} >> s2par.par
    echo ${nspecr} >> s2par.par
    echo ${lu_source} >> s2par.par
    echo ${shipping} >> s2par.par

echo "... source2chimere program execution:"
time ./source2chimere.e || { echo "source2chimere.e failure"; exit 1; }
echo "... end of emissions pre-processing for source "${sources}"
wait

mv MON*${dom}* ${pdir}/${dom}
wait

done
# end of loop over sources

# for each year and for each species, make full monthly emissions data set

list_month='01 02 03 04 05 06 07 08 09 10 11 12'

echo "======"
echo "o Loop over months"

for mon in $list_month ; do

echo " Preparation of sectoremis parameters"
    echo ${i} > sectemis.par
    echo ${mon} >> sectemis.par
    echo ${nzonal} >> sectemis.par
    echo ${nmerid} >> sectemis.par

```

```
echo   ${npoltot}                                >> sectemis.par
echo   ${nspecm}                                  >> sectemis.par
echo   ${nspecr}                                  >> sectemis.par
echo   ${dom}                                     >> sectemis.par
echo   ${pdir}/inputdata/SHIFT-TIME.data         >> sectemis.par
echo   ${pdir}/inputdata/AGGREGATION.${outputspecies} >> sectemis.par
echo   ${coordfile}                              >> sectemis.par
echo   ${list_spec}                              >> sectemis.par
echo   ${outdir}/EMI_${i}                        >> sectemis.par
echo   ${pdir}/inputdata/HOURLY-FACS-new        >> sectemis.par
echo   ${pdir}/${dom}                            >> sectemis.par
echo   ${lu_source}                              >> sectemis.par

time ./sectoremis.e || { echo "sectoremis.e failure"; exit 1; }

done
# end of loop over months
done
echo "---- normal termination of emiSURF program"
# end of loop over years
```

Referencias

Allende, D. G., Castro, F. H., y Puliafito, S. E. 2010a. Air pollution characterization and modeling of an industrial intermediate city. *International Journal of Applied Environmental Sciences* 5: 275 - 296.

Allende, D.G., Cremades, P.G., Puliafito, S.E., Fernández, R.P. y Pérez Gunella, F. 2010b. 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: 127 - 134.

Allende, D. G., Puliafito, S. E., Fernández, R. P., Castro, F. H. y Cremades, P. G. 2012. Herramientas para la evaluación integral de la calidad de aire en Argentina: modelos de escala urbana y regional. *Revista Proyecciones- UTN-FRBA* 10: 31 - 44.

Andrés, D. A., Ferrero, E. J., Mackler, C. E., Santambrosio, E. y Mastrángelo, D. 2006. Estudio de la contaminación atmosférica por óxidos de nitrógeno en la ciudad de Rosario.

Andrés, D. A., Ferrero, E. J., Ferrari, L. C., Fernández, J. F. y Lauricella, F. N. 2010. Comparación de la contaminación urbana por óxidos de nitrógeno en las ciudades

de Mendoza, Rosario y Santa Fe.

Andrés, D. A., Ferrero, E. J. Mackler, C. E., Ferrari, L. C. y Dupuy, M. A. 2013. Influencia de altura de mezclado en la concentración de contaminantes del aire.

Atkinson, R. 1989. Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with organic compounds. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, Monograph 1: 1 - 246.

Atkinson R., y Arey, J. 1994. Atmospheric chemistry of gas-phase polycyclic aromatic hydrocarbons: Formation of atmospheric mutagens. *Environmental Health Perspectives* 102 (Suppl. 4): 117 - 126.

Atkinson R. 1995. Gas phase tropospheric chemistry of organic compounds. *Volatile Organic Compounds in the Atmosphere, Issues in Environmental Science and Technology*, 4, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK. p. 65 - 89.

Atkinson R. 1997. Gas phase tropospheric chemistry of volatile organic compounds. 1. Alkanes and alkenes. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 26: 215 - 290.

Atkinson, R. 2000. Atmospheric chemistry of VOCs and NOx. *Atmospheric Environment* 34: 2063 - 2101.

Bell, M. L., Cifuentes, L. a, Davis, D. L., Cushing, E., Telles, A. G. y Gouveia, N. 2011. Environmental health indicators and a case study of air pollution in Latin American cities. *Environmental Research*, 111(1): 57 - 66. doi:10.1016/j.envres.2010.10.005.

Berresheim, H., Wine, P. H., y Davis, D. D. 1995. Sulfur in the atmosphere,

in Composition, Chemistry, and Climate of the Atmosphere, H. B. Singh, ed., Van Nostrand Reinhold, New York. 251 - 307.

Bianco, L. 2008. Surface layer parameterization in WRF. ATOC 7500: Mesoscale Meteorological Modeling. Spring 2008.

Bogo, H., Negri, R. M. y San Román, E. 1999. Continuous measurement of gaseous pollutants in Buenos Aires city. *Atmospheric Environment* 33: 2587 - 2598.

Bogo, H., Gómez, D. R., Reich, S. L., Negri, R. M. y San Román, E. 2001. Traffic pollution in a downtown site of Buenos Aires City. *Atmospheric Environment* 35: 1717 - 1727.

Bogo, H., Otero, M., Castro, P., Ozafrán, M. J., Kreiner, A., Calvo, E. J., y Negri, R. M. 2003. Study of atmospheric particulate matter in Buenos Aires city. *Atmospheric Environment*, 37(8): 1135 - 1147. doi:10.1016/S1352-2310(02)00977-9.

Carreras, H. A. y Pignata, M. L. 2002. Biomonitoring of heavy metals and air quality in Cordoba City, Argentina, using transplanted lichens. *Environmental Pollution* 117(1): 77 - 87.

Carreras, H. A., Pignata, M. L. y Saldiva, P. H. N. 2006. In situ monitoring of urban air in Córdoba, Argentina using the *Tradescantia-micronucleus* (Trad-MCN) bioassay. *Atmospheric Environment*, 40: 7824 - 7830. doi:10.1016/j.atmosenv.2006.07.031.

Castro-Videla, F., Barnaba, F., Angelini, F., Cremades, P., y Gobbi, G. P. 2013. The relative role of Amazonian and non-Amazonian fires in building up the aerosol optical depth in South America: A five year study (2005–2009). *Atmospheric Research*, 122: 298 - 309. doi:10.1016/j.atmosres.2012.10.026.

Chang, J.C. y Hanna, S.R., 2004. Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics* 87: 167 - 196.

Cianni, N., Müller, A., Lespade, P., Aguilar, M., Matamoros, Colman, E., Martín, M., Chiapperini, V., Bussi, L., Massolo, L. y Wichmann, F. 2009. Calidad del aire y salud infantil en áreas urbanas e industriales de La Plata y Ensenada, Argentina. II Reunión anual Proyecto Integrador PROIMCA, Universidad Tecnológica Nacional, San Nicolás de los Arroyos, 30 y 31 de octubre 2007.

Cremades, P.G., Allende, D.G. y Puliafito, S. E. 2011. Integración de modelos para la estimación del impacto en la calidad de aire de la quema de biomasa en el norte Argentino. *Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente*, Vol. 15. ISSN 0329-5184, Río Hondo, Argentina, p. 01.37 - 01.44.

D'Angiola, A., Dawidowski, L. E., Gómez, D. R. y Osses, M. 2010. On-road traffic emissions in a megacity. *Atmospheric Environment*, 44(4): 483 - 493. doi:10.1016/j.atmosenv.2009.11.004.

DeMore W.B., Sander S.P., Golden D.M., Hampson R.F., Kurylo M.J. Howard C.J., Ravishankara A.R., Kolb C.E. y Molina M.J. Chemical Kinetics and Photochemical Data for use in Stratospheric Modeling, Evaluation No. 12, NASA Panel for Data Evaluation, Jet Propulsion Laboratory Publication 97-4, Pasadena, CA, January 15 1997.

Dennis, R., Fox., T., Fuentes, M., Gilliland, A., Hanna, S., Hogrefe, C., Irwin, J., Rao, T., Scheffe, R., Schere, K., Steyn, D. y Venkatram, A. 2010. A framework for evaluating regional-scale numerical photochemical modeling systems. *Environmental Fluid Mechanism* 10: 471 - 489. doi 10.1007/s10652-009-9163-2.

Derwent, D., Fraser, A., Abbott, J., Willis, P. y Murrells, T., 2010. Evaluating the performance of air quality models (No. Issue 3). Department for Environment and

Rural Affairs.

Dudhia, J., 2011: The Weather Research and Forecasting Model: 2011 Annual Update. Preprints, 12th WRF's Users Workshop.

EMEP/CORINAIR. 2000. Atmospheric emission inventory guidebook. Second edition, EEA (European Environment Agency).

Fernández, R., Allende, D., Castro, F., Cremades, P. y Puliafito, E. 2010. Regional Air Quality Modeling using WRF/Chem: implementation of global and local databases for Mendoza, Argentina. *Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente (AERMA)* 14: 43 - 50. ISSN 0329-5284.

Finlayson-Pitts, B. J. y Pitts, J. 2000. Theory, experiments, and applications, in: *Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere*, primera edición, San Diego, Academic Press.

Fundación Bariloche. 2005. Inventario nacional de la República Argentina, de fuentes de emisiones y absorciones de gases de efecto invernadero, no controlados por el Protocolo de Montreal. Inventario correspondiente al año 2000 y revisión de los inventarios 1990, 1994 y 1997.

Gallardo, L., Escribano, J., Dawidowski, L., Rojas, N., Andrade, M. F. y Osses, M. 2012. Evaluation of vehicle emission inventories for carbon monoxide and nitrogen oxides for Bogotá, Buenos Aires, Santiago, and São Paulo. *Atmospheric Environment*, 47: 12 - 19. doi:10.1016/j.atmosenv.2011.11.051.

García Ferreyra, M. F. 2008. Análisis de la genotoxicidad de extractos orgánicos e inorgánicos de material particulado colectado en las ciudades de Córdoba y Río Ceballos, mediante el Ensayo de Micronúcleos. Tesis de Grado. Facultad de Ciencias

Químicas. Universidad Nacional de Córdoba.

INDEC. Instituto Nacional de Estadísticas y Censos. Censo 2010. www.indec.gov.ar

IPCC. 1996. Directrices del IPCC para los inventarios nacionales de gases de efecto invernadero. Versión Revisada en 1996. Volumen 2

Ipiña, A., Salum, G. M., Crinó, E. y Piacentini, R. D. 2012. Satellite and ground detection of very dense smoke clouds produced on the islands of the Paraná river delta that affected a large region in Central Argentina. *Advances in Space Research*, 49(5): 966 - 977. doi:10.1016/j.asr.2011.12.009.

IPSL, INERIS y LISA. 2011. Documentation of the chemistry-transport model CHIMERE. www.lmd.polytechnique.fr/chimere

Irwin, J. S., Civerolo, K., Hogrefe, C., Appel, W., Foley, K. y Swall, J. 2008. A procedure for inter-comparing the skill of regional-scale air quality model simulations of daily maximum 8-h ozone concentrations. *Atmospheric Environment* 42: 5403 - 5412.

Jacob, D. J. 1999. Heterogeneous chemistry and tropospheric ozone. *Atmospheric Environment* 34: 2131 - 2159.

Jasan, R. C., Plá, R. R., Invernizzi, R. y Dos Santos, M. 2009. Characterization of atmospheric aerosol in Buenos Aires, Argentina. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 281(1): 101 - 105. doi:10.1007/s10967-009-0071-1.

Jenkin, M. E. y Clemitshaw, K. C. 2000. Ozone and other secondary photochemical pollutants: chemical processes governing their formation in the planetary boundary layer. *Atmospheric Environment* 34: 2499 - 2527.

Leighton, P. A. 1961. *Photochemistry of Air Pollution*. Academic Press, New York.

López, M. L., Ceppi, S., Palancar, G. G., Olcese, L. E., Tirao, G. y Toselli, B. M. 2011. Elemental concentration and source identification of PM10 and PM2.5 by SR-XRF in Córdoba City, Argentina. *Atmospheric Environment*, 45: 5450 - 5457. doi:10.1016/j.atmosenv.2011.07.003.

Massolo, L., Rehwagen, M., Porta, A., Ronco, A., Herbarth, O., y Mueller, A. 2009. Indoor–Outdoor Distribution and Risk Assessment of Volatile Organic Compounds in the Atmosphere of Industrial and Urban Areas, 339 - 349. doi:10.1002/tox.

Mazzeo, N. A. y Venegas, L. E. 2003. Carbon monoxide and nitrogen oxides emission inventory for Buenos Aires City (Argentina). In R. S. Sokhi & J. Brechler (Eds.), *Fourth international conference on urban air quality-measurement, modelling & management* (p. 159 - 162). UK: University of Hertfordshire.

Micheletti, M. I., Murrini, L. G., Debray, M. E., Rosenbusch, M., Graf, M., Ávila Cadena, G. y Vitale, Davidson, P. J. y Somacal H. 2012. Elemental analysis of aerosols collected at the Pierre Auger Cosmic Ray Observatory with PIXE technique complemented with SEM/EDX. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 288: 10 - 17. doi:10.1016/j.nimb.2012.07.022.

Menuet, L., Bessagnet, B., Khvorostyanov, D., Beekmann, M., Blond, N., Collette, A., Coll, I., Curci, G., Foret, G., Hodzic, A., Mailler, S., Meleux, F., Monge, J. L., Pison, I., Siour, G., Turquety, S., Valari, M., Vautard, R. y Vivanco, G. 2013. CHIMERE 2013: a model for regional atmospheric composition modelling. *Geoscientific Model Development* 6: 981 - 1028.

MMM y NCEP. 2012. *User's Guide ARW Version 3 Modeling System User's Guide*. www.mmm.ucar.edu/wrf/users

National Research Council. Rethinking the ozone problem in urban and regional air pollution. National Academy Press, Washington, DC, 1991.

Olcese, L. E. y Toselli, B. M. 2002. Some aspects of air pollution in Córdoba, Argentina. *Atmospheric Environment* 36: 299 - 306.

OMM. 2012. Impacts of Megacities on Air Pollution and Climate. Organización Mundial de Meteorología. Chair Publications Board. Geneva, Switzerland.

OMS. 2006. Air quality guidelines of WHO for particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide, Global update 2005. Organización Mundial de la Salud.

Orte, M. A. 2011. Estudio y análisis de la contaminación atmosférica mediante técnicas físicas y químicas en los alrededores del Polo Petroquímico de La Plata. Tesis de Grado. Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires.

Pineda Rojas, A. L. y Venegas, L. E. 2012. Spatial distribution of ground-level urban background O₃ concentrations in the Metropolitan Area of Buenos Aires, Argentina. *Environmental pollution*, Available online 14 December 2012. doi:10.1016/j.envpol.2012.11.013

Piriz-Carrillo, V. R., Gasparri, N. I., Grau, H. R. y Paolini L. 2010. Monitoreo satelital de fuegos en el área cañera de la provincia de Tucumán, Argentina. SELPER. Ed. especial Vol 2: 5 - 13

PORG, 1997. Ozone in the United Kingdom. Fourth Report of the UK Photochemical Oxidants Review Group, Department of the Environment, Transport and the Regions, London.

Puliafito, E., Guevara, M., y Puliafito, C. 2003. Characterization of urban air quality using GIS as a management system. *Environmental pollution* 122(1): 105 - 17.

Puliafito, E., y Allende, D. G. 2007. Emission patterns of urban air pollution. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia* 42: 38 - 56.

Puliafito, E. 2009. Gestión de la calidad del aire en Argentina. II Reunión anual Proyecto Integrador PROIMCA, Universidad Tecnológica Nacional, San Nicolás de los Arroyos, 30 y 31 de octubre 2007.

Reich, S., Magallanes, J., Dawidowski, L., Gómez, D., Groselj, N. y Zupan, J. 2006. An analysis of secondary pollutants in Buenos Aires City. *Environmental monitoring and assessment*, 119: 441 - 57. doi:10.1007/s10661-005-9035-2.

Ristori, P., Otero, L., Fochesatto, J., Flamant, P. H., Wolfram, E., Quel, E., Piacentini, R. y Holben, B. 2003. Aerosol optical properties measured in Argentina: wavelength dependence and variability based on sun photometer measurements, *Optics and Lasers in Engineering* 40: 91 - 104.

Schlink, U., Herbarth, O., Richter, M., Rehwagen, M., Puliafito, J. L., Puliafito, E., Puliafito, C., Behler, J. C., y Puliafito, E. 1999. Ozone-monitoring in Mendoza, Argentina. Initial results. *Journal of the Air & Waste Management Association* 49: 82 - 97.

Schmidt, H., Derognat, C., Vautard, R. y Beekman. 2001. A comparison of simulated and observed ozone mixing ratios for the summer of 1998 in Western Europe. *Atmospheric Environment* 35: 6277 - 6297.

Secretaría de Ambiente y Desarrollo Sustentable de la Nación. 2008. Primer Compendio de Estadísticas Ambientales. República Argentina.

Seinfeld, J. H. y Pandis, S. N. 2006. *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*, John Wiley, New York.

Stein, A. E., y Toselli, B. M. 1996. Street level air pollution in Cordoba city, Argentina. *Atmospheric Environment* 30: 3491 - 3495.

Stull, R. B., 1988: *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, p. 666.

Thunis, P., Pederzoli, A. y Pernigotti, D. 2012. Performance criteria to evaluate air quality modeling applications. *Atmospheric Environment* 59: 476 - 482.

Ulke, A. G. y Mazzeo, N. 1998. Climatological aspects of the daytime mixing height in Buenos Aires city, Argentina. *Atmospheric Environment*, 32: 1615 - 1622. doi:10.1016/S1352-2310(97)00396-8.

Venegas, L E y Mazzeo, N A, 2006. Modelling of urban background pollution in Buenos Aires City (Argentina). *Environmental Modelling & Software* 21: 577 - 586.

Weaver, C. S., y Balam, M. 1999. Preparation of the Air Quality Component of the Argentinean Pollution Management Project. Task 2 Report: Emission Inventory and Preliminary List of Control Measures. Secretaría de Recursos Naturales y Desarrollo Sustentable, Buenos Aires.

Wichmann, F. A, Müller, A., Busi, L. E., Cianni, N., Massolo, L., Schlink, U., Porta, A., y Sly, P. D. 2009. Increased asthma and respiratory symptoms in children exposed to petrochemical pollution. *The Journal of allergy and clinical immunology*, 123(3): 632 - 638. doi:10.1016/j.jaci.2008.09.052.