



UNIVERSIDAD DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
DEPARTAMENTO DE GEOFÍSICA  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA

MEJORAS EN LA SEÑAL SATELITAL DE DIÓXIDO DE AZUFRE DE  
MEGAFUENTES EN CHILE CENTRAL

TESIS PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO  
TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE MAGÍSTER EN METEOROLOGÍA Y  
CLIMATOLOGÍA

FÉLIX MARCIAL CARRASCO GALLEGUILLOS

PROFESOR GUÍA:  
SRA. LAURA E. G. GALLARDO KLENNER

PROFESOR CO-GUÍA:  
SR. AXEL E. OSSES ALVARADO

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:  
SR. ROBERTO F. RONDANELLI ROJAS  
SR. MARCOS A. DÍAZ QUEZADA  
SRA. ANA MARÍA CORDOVA LEAL

SANTIAGO DE CHILE  
AGOSTO 2012

*“¿A vos no te pasa que te despertás a veces con la exacta conciencia de que en ese momento empieza una increíble equivocación?”*

*Julio Cortázar*

---

## AGRADECIMIENTOS

En este trabajo quiero agradecer a mis padres, a mi hermana y a mi “recién” nacida sobrina Amanda por todo el cariño y apoyo que me han dado en todo mi tiempo en la Universidad, que por cierto no es menor. Sin ser repetitivo en términos de lo que es un capítulo de agradecimiento, debo decir que sin ese apoyo día a día jamás estaría llegando y terminando este proceso. Gracias familia, por aguantar mis mañas, darme una buena comida y levantarme el ánimo cuando fue necesario.

También quiero agradecer el apoyo de la gran familia de amigos que he ido reuniendo a lo largo del tiempo. Gracias a mis amigos del barrio, por darme esa componente de vida del vecindario, necesaria para mi completitud, mención especial a Celeste Pavez, Israel Rojas y Daniel Alvarado, por ser de esos amigos necesarios, alegres y confiables. A mis amigos de la Universidad, por que siempre va a ser un placer conversar, dispersar y discutir sobre cualquier tema y en particular sobre ciencias, mención honorable a Jerónimo Escribano, Julio Backhoff, Guido Lagos, Tomás González y tanto matemático e ingeniero por ahí perdido. A mis amigos que del colegio por mantener la amistad incluso hasta estas alturas y que de seguro seguirá, la mención en este caso es para Manuel Fuentealba y Santiago González . Gracias a todos mis amigos por las conversas y por la distracción que me brindan que, aunque no lo crean, hacen más alegre y fácil el vivir.

Como no, quiero agradecer a mis profesores guías Laura Gallardo y Axel Osses, por que sin duda, tienen mucha responsabilidad en lo que estoy haciendo ahora. Gracias por sus consejos y discusiones que sin duda han ayudado para finalizar esta tesis. Gracias también por incentivar el trabajo multidisciplinario con su ejemplo, fue total inspiración para las cosas que he echo durante mis últimos años en la Universidad.

Gracias a la gente que me ayudo a utilizar las herramientas que completan este trabajo. A la gente del Centro de Modelamiento (CMM) como Juan Carlos Maureira, J. F. Fillâtre, María Inés Rivera. Al grupo de trabajo de HIRLAM: Laura Rontu, Martynas Kauzlaskas, Xiaohua Yang. Al profesor Randall Martin de la Universidad de Dalhousie, Canadá, por confiar en mi trabajo y ser un soporte durante mi estadía en ese nórdico país. Muchas gracias a aquellos que se dieron el tiempo de discutir sobre el tema de mis tesis y me aconsejaron. Finalmente gracias al CMM por ser el soporte económico durante mi trabajo de tesis.

RESUMEN DE LA MEMORIA  
PARA OPTAR AL TÍTULO DE  
INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO  
Y OBTENER EL GRADO DE MAGÍSTER EN METEOROLOGÍA Y CLIMATOLOGÍA  
POR: FÉLIX MARCIAL CARRASCO GALLEGUILLOS  
FECHA:  
PROF. GUÍA: LAURA GALLARDO KLENNER  
PROF. CO-GUÍA : AXEL OSSES

## MEJORAS EN LA SEÑAL SATELITAL DE DIÓXIDO DE AZUFRE DE MEGAFUENTES EN CHILE CENTRAL

A lo largo de Chile existen diversas fuentes de dióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ) de origen antrópico (fundiciones de cobre, termoeléctricas, etc.) como de origen natural (volcanes, proceso biogénicos, etc.). En Chile, se estima que durante el año 2005 las fundiciones de Caletones, Ventanas y Chagres emitieron 77GgS en conjunto, cantidad similar a las emisiones totales de países desarrollados. Dados los impactos sobre la salud humana, los ecosistemas y el clima asociados al  $\text{SO}_2$  y compuestos oxidados de azufre, se requiere contar con mediciones confiables de  $\text{SO}_2$  de manera de tener un control sobre la abundancia, distribución y emisiones.

El ozono ( $\text{O}_3$ ) y el  $\text{SO}_2$  tienen líneas espectrales de absorción similar en el ultravioleta (UV), siendo el  $\text{O}_3$  mucho más abundante que el  $\text{SO}_2$ . Este último, se comenzó a estimar como una corrección a la estimación de carga atmosférica de  $\text{O}_3$  en la década de 1980, donde la carga atmosférica de un compuesto corresponde a la integral en la vertical de la concentración del compuesto, medido en *moleculas/cm2* o Unidades Dobson ( $1 \text{ DU} = 2.69 \times 10^{16} \text{ moleculas/cm2}$ ). Subsecuentemente, la técnica de filtrado se ha mejorado pudiéndose hoy registrar la carga de  $\text{SO}_2$  con un error de fondo de 0.2 DU. Operacionalmente, se supone un perfil basado en mediciones hechas en EE.UU. En este estudio se analiza la validez de suponer el mismo perfil en la zona centro de Chile, caracterizada por una compleja circulación debido a su topografía, lo que le otorga una variedad de forma y distribución a los perfiles. La metodología plantea usar combinadamente un modelo de transporte de baja resolución horizontal ( $\sim 10\text{km}$ ), para calcular los perfiles de  $\text{SO}_2$  en la zona de estudio y un modelo de transferencia radiativa, para estimar los efectos de la dispersión y absorción del  $\text{SO}_2$  en la atmósfera. El modelo de transferencia radiativa, permite simular la medición satelital, considerando el perfil modelado. De esta manera es posible estimar la sensibilidad de la estimación de carga de  $\text{SO}_2$ , con respecto a los perfiles a lo largo de Chile Central. Las estimaciones de  $\text{SO}_2$  se corrigen al cambiar el perfil de  $\text{SO}_2$  y además se implementa un filtro estadístico que elimina aquellos datos fuera de los percentiles 1 y 99 de la población y que además elimina la variabilidad mensual, a través de un filtro de Fourier, considerando que el tiempo de residencia del  $\text{SO}_2$  es del orden de días. El resultado principal es la corrección de las estimaciones de  $\text{SO}_2$  en la zona central de Chile, con una sensibilidad entre un 40 %-80 %.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Objetivos y Metodología</b>	<b>5</b>
2.1. Objetivos . . . . .	5
2.2. Metodología . . . . .	5
<b>3. Percepción remota de SO<sub>2</sub></b>	<b>9</b>
3.1. Antecedentes . . . . .	9
3.2. Instrumento de Monitoreo de Ozono . . . . .	12
<b>4. Simulación de la dispersión de azufre oxidado</b>	<b>16</b>
4.1. Modelación . . . . .	16
4.2. Emisiones . . . . .	18
4.3. Validación . . . . .	18
4.3.1. Validación Meteorológica . . . . .	18
4.3.2. Validación de concentración de SO <sub>2</sub> . . . . .	21
<b>5. Transferencia Radiativa</b>	<b>28</b>
5.1. Parametrización del AMF . . . . .	28
5.2. Modelo de Transferencia Radiativa . . . . .	32
<b>6. Resultados</b>	<b>34</b>
<b>7. Conclusiones</b>	<b>47</b>
7.1. Trabajo Futuro . . . . .	48
<b>Bibliografía</b>	<b>50</b>
<b>A. Código AMF</b>	<b>55</b>
<b>B. Manual HIRLAM</b>	<b>69</b>
B.1. HIRLAM: How to run the model in Levque? . . . . .	69

# Capítulo 1

## Introducción

Hoy en día, los sensores dispuestos en satélites permiten observar la composición química de la tropósfera (Martin, 2008). Esta información incluye datos de aerosoles, nubes y trazas atmosféricas, entre otros. Sin embargo estos datos deben ser cuidadosamente validados utilizando otras mediciones así como los algoritmos de recuperación de información (Fishman et al., 2008). Por otro lado, existe la información proporcionada por los modelos numéricos, que también debe ser evaluada y contrastada con observaciones, pues los modelos adolecen de errores y simplificaciones. Es por ello que se hace necesario contar con técnicas que permitan obtener, bajo un criterio de optimalidad, la mejor estimación del estado de un sistema dinámico, usando ambas fuentes de información. En este sentido, la asimilación de datos es una herramienta que permite combinar de modo óptimo modelos y mediciones (e.g. Eckhardt et al., 2008). El presente trabajo se enmarca en este contexto.

Las trazas a considerar en este trabajo son el dióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ) y el sulfato, que considera compuestos tanto en fase gaseosa (aerosoles de sulfato), como en fase líquida (ácido sulfúrico), y que en su conjunto, se conocen como azufre oxidado. El  $\text{SO}_2$  es una traza atmosférica de interés en Chile dado que en el país existen diversas fuentes, tales como volcanes, fundiciones de cobre y termoeléctricas entre otras. Se estima que sólo las fundiciones de cobre Caletones, Ventanas y Chagres emitieron en conjunto 77GgS de azufre el año 2005 (Castillo, 2011). Esto se compara con la emisión total de países desarrollados como Suecia (52GgS), Portugal (306GgS) y Holanda (72GgS) para el mismo año (Vestreng et al., 2007). Es sabido que este compuesto es dañino para la salud, ya que produce problemas respiratorios agudos y a la vista (de la Salud, 2012). También hay que considerar que el azufre oxidado impacta o promueve la formación de núcleos de condensación de nubes, pudiendo producir cambios en las tasas de precipitación y la cantidad de radiación recibida en la superficie terrestre (e.g. Löndahl et al., 2010).

La percepción remota consiste en la inversión de mediciones radiométricas realizadas a distancia. Usualmente las mediciones están acotadas a ciertas longitudes de onda, dependiendo del instrumento y de lo que se quiere estimar mediante la percepción remota (Liou, 2002). Para el caso de estimación de trazas atmosféricas se utiliza la atenuación de la intensidad de radiación que atraviesa un medio, en este caso la atmósfera (Martin, 2008). Esta atenuación esta dada por la ley de Beer-Bouguer:

$$I_B = I_{B_0} e^{-\tau_s} \quad (1.1)$$

donde  $I_B$  corresponde a la intensidad retro-dispersada observada por el instrumento satelital,  $I_{B_0}$  corresponde a la intensidad retro-dispersada que se observaría en la ausencia de un compuesto que absorba y  $\tau_s$  es el espesor óptico para la columna inclinada. Para el caso del  $\text{SO}_2$  se utiliza la longitud de onda correspondiente a la zona ultravioleta (UV) del espectro, aunque también es posible utilizar la zona infrarroja (IR).

El dióxido de azufre es observado desde varios espectrómetros a bordo de satélites utilizando la percepción remota (Martin, 2008). Los instrumentos: GOME (Burrows et al., 1998), SCHIAMACHY (Richter et al., 2006), OMI (Krotkov et al., 2006) e IASI/MetOp (Clerbaux et al., 2009), tienen productos que estiman la carga de  $\text{SO}_2$  en la atmósfera. La mayoría de estos instrumentos utiliza la zona ultravioleta (UV) para la detección de  $\text{SO}_2$  a diferencia de IASI/MetOp que utiliza la banda infrarroja (IR) para la estimación. Todos estos instrumentos tienen sensibilidad para monitorear plumas volcánicas cuando hay erupción y sólo el instrumento OMI (Ozone Monitoring Instrument), (Levelt et al., 2006) cuenta con un producto de carga troposférica de  $\text{SO}_2$  (Krotkov et al., 2006). Actualmente existen trabajos que analizan datos de OMI para caracterizar algunas fuentes como el seguimiento de la pluma volcánica de Chaitén (Carn, 2008), o estimar la emisión de fundiciones de cobre (Carn et al., 2007) e incluso algunas ciudades contaminadas como el noreste de China (Krotkov et al., 2008). Sin embargo cada uno de estas caracterizaciones necesitó de revisión de la señal de los datos, ya que la señal es sensible a cambios en el perfil de  $\text{SO}_2$ , el albedo, la nubosidad, etc., recordando que los algoritmos con los cuales se estima la carga suponen valores conocidos sobre estas variables (Krotkov et al., 2006).

Un parámetro clave es el llamado Factor de Masa Atmosférico (AMF) el cual convierte las columnas inclinadas medidas en columnas verticales. La definición del AMF es:

$$AMF = \frac{\Omega_s}{\Omega_v} = \frac{\tau_s}{\tau_v} \quad (1.2)$$

donde  $\Omega_s$  y  $\Omega_v$  corresponden a la columna inclinada y vertical respectivamente y  $\tau_s$  y  $\tau_v$  corresponden al espesor óptico inclinado y vertical respectivamente. El AMF depende entre otras cosas del perfil de  $\text{SO}_2$ , la columna total de ozono ( $\text{O}_3$ ), el albedo, el ángulo cenital solar (SZA), el ángulo de visión del satélite (VZA), la nubosidad, el albedo y la dispersión. Una forma de incluir estas variables para calcular el AMF es utilizando la fórmula propuesta en Palmer et al. (2001) y que se encuentra explicado con más detalle en el capítulo 5. La formulación en este caso esta hecha en coordenadas  $\sigma$  para la altura, que corresponde a considerar un escalamiento de la presión por la presión superficial ( $\sigma = p/p_0$ ) o la presión al tope de la atmósfera ( $\sigma = p/p_{top}$ ):

$$AMF = \int_0^1 \omega(\sigma)S(\sigma)d\sigma \quad (1.3)$$

donde la función  $\omega$  representa la sensibilidad de la intensidad con respecto al  $\text{SO}_2$ , y la función  $S$  representa un perfil normalizado de dióxido de azufre.

Actualmente los datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$  que se obtienen utilizan un AMF de valor constante para cada punto de medición, este valor se calculó utilizando un perfil vertical de  $\text{SO}_2$  medido al Este de EE.UU., un perfil de ozono de latitudes medias, un

ángulo cenital solar igual a  $30^\circ$ , albedo superficial igual a 5% y considerando que no hay nubosidad ni aerosoles (Krotkov et al., 2006). Existen dos estudios importantes en los cuales se estima la sensibilidad del AMF con respecto a las variables mencionadas: Krotkov et al. (2008) que consideró los datos de una campaña de mediciones de perfil con instrumentos sobre aviones en el noreste de China (EAST-AIRE) (Dickerson et al., 2007) encontrando una sobreestimación en los valores corregidos con respecto a los valores medidos con los aviones; el trabajo de Lee et al. (2009) en el cual se utilizó un modelo a escala global con una resolución de  $2^\circ \times 2,5^\circ$  (Geos-Chem) (Bey et al., 2001) para la representación de las variables como el perfil de  $\text{SO}_2$  y el perfil de aerosoles, concluyendo que las mediciones corregidas estaban mejor correlacionadas con las mediciones de carga de  $\text{SO}_2$  en EE.UU. Si bien existen trabajos similares con estimaciones de carga de otros satélites e.g. Khokar et al. (2005) en esta tesis sólo utilizaremos las estimaciones de OMI debido a su resolución ( $13 \times 24 \text{ km}$ ), periodicidad (cobertura global diaria) y su significativa reducción del ruido de fondo de estas mediciones (Krotkov et al., 2006; Levelt et al., 2006).

La dispersión regional de azufre oxidado en Chile ha sido estudiada en diversas ocasiones: distribución regional de azufre oxidado en Chile central usando modelos de dispersión (Olivares et al., 2002), influencia de las bajas costeras en la dispersión de  $\text{SO}_2$  en Chile central (Gallardo et al., 2002), impacto de fuentes antrópicas en la cubierta de estratocúmulos en la zona norte de Chile (Huneeus et al., 2006) y modelación de azufre oxidado e implementación de una metodología inversa para fuentes puntuales en la zona central de Chile, para el año 2005 (Castillo, 2011). Esto permite utilizar este sistema de modelación para reproducir la distribución vertical de  $\text{SO}_2$  en la zona central, de manera de estimar la variabilidad del AMF y corregir la carga estimada con OMI. Es necesario indicar que al utilizar un modelo de escala regional es posible reducir la resolución horizontal, beneficiando las fuentes menores que se encuentran en la región y que no son posible de distinguir en un modelo global como Geos-Chem (Bey et al., 2001)).

La contribución de este trabajo está en revisar el algoritmo de recuperación de  $\text{SO}_2$  y estimar la sensibilidad de la estimación de carga de OMI con respecto al perfil de azufre oxidado en la zona centro de Chile. Para ello se implementó un método para corregir las estimaciones satelitales utilizando combinadamente un modelo de dispersión atmosférica, *Atmospheric Transport and Chemistry Model* (MATCH) (Robertson et al., 1999) y un modelo de transferencia radiativa, *Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer* (LIDORT) (Spurr et al., 2000). Específicamente se adaptará la metodología propuesta a escala global por Lee et al. (2009). Se considerará como región de interés la zona minera de Chile Central, esta zona se elige principalmente debido a la presencia de Caletones, fuente que es posible observar con los datos satelitales de OMI (Castillo, 2011). Para los escenarios de emisiones en el centro de Chile, se utilizará el inventario hecho por el DICTUC (DICTUC, 2012), utilizado para estudios de modelación en la misma zona (Castillo, 2011). Para la fundición Caletones se cuenta con las mediciones de  $\text{SO}_2$  hechas para su plan de descontaminación desde el año 1998.

El primer capítulo de esta tesis describe los objetivos y la metodología. La descripción de la estimación de carga de  $\text{SO}_2$  se desarrolla en el segundo capítulo. El tercer capítulo se describe la configuración de la modelación de dióxido de azufre y la validación de los campos de concentración del compuesto. El cuarto capítulo describe los procesos de transferencia radiativa considerados en el trabajo, incluyendo la parametrización del AMF utilizado. El quinto capítulo muestra los resultados obtenidos. Finalmente se presentan las conclusiones y se discute el trabajo futuro.

# Capítulo 2

## Objetivos y Metodología

### 2.1. Objetivos

Los objetivos en esta tesis son:

#### Objetivo general

Dado que la estimación de  $\text{SO}_2$  de OMI supone un perfil vertical de dióxido de azufre medido en EE.UU., el objetivo general de la tesis está en, estudiar la sensibilidad de la estimación satelital de carga de dióxido de azufre a la distribución vertical de  $\text{SO}_2$  a través de la simulación de los procesos de dispersión de azufre oxidado y de la transferencia radiativa en la zona central de Chile.

#### Objetivos específicos

- Estimar el factor de masa atmosférico (AMF) para todo punto de medición en la zona de estudio, utilizando un modelo de transferencia radiativa (LIDORT) (Spurr et al., 2000) y un modelo de dispersión de contaminantes a escala regional (MATCH) (Robertson et al., 1999).
- Cuantificar la sensibilidad del AMF con respecto a cambios en el perfil de  $\text{SO}_2$ .
- Determinar la sensibilidad de la estimación de carga con respecto a cambios en el perfil de  $\text{SO}_2$  para la zona central de Chile.

### 2.2. Metodología

La metodología está basada en el trabajo a escala global realizado en Lee et al. (2009). En dicho trabajo se calcula el AMF utilizando perfiles calculados con un modelo de transporte a escala global GEOS-Chem (Lee et al., 2009) y además se utiliza un modelo de transferencia radiativa para calcular la sensibilidad de la intensidad de radiación con respecto a la cantidad de  $\text{SO}_2$  en altura. El primer paso consiste en la descarga de los datos de  $\text{SO}_2$  del Instrumento de Monitoreo de Ozono (OMI) (Krotkov et al., 2006) a bordo del satélite AURA (<http://aura.gsfc.nasa.gov/index.html>). Los datos de OMI tienen 4

productos, pero sólo uno está diseñado para estimar la cantidad de  $\text{SO}_2$  a baja altura denominado SO2PBL. Los datos se pueden descargar del sitio web del *Goddard Earth Sciences Data and Information Services* (GES-DISC) ([http://disc.sci.gsfc.nasa.gov/Aura/data-holdings/OMI/omso2\\_v003.shtml](http://disc.sci.gsfc.nasa.gov/Aura/data-holdings/OMI/omso2_v003.shtml)). Para la realización de este trabajo se descendieron los datos desde el 31 de Diciembre del 2005 hasta el 1 de Abril del 2006 y se consideró el dominio desde  $32^\circ\text{S}$  hasta  $36^\circ\text{S}$  en latitud y  $100^\circ\text{O}$  hasta  $69^\circ\text{O}$  en longitud. El dominio se escoge de manera que abarque una gran zona del Océano Pacífico, pues las mediciones en este sector se utilizan para calcular el ruido de fondo que tienen las estimaciones de  $\text{SO}_2$  (Krotkov et al., 2006), usualmente conocido como señal del Pacífico. La descripción más completa del algoritmo de estimación se encuentra en la sección 3.2.

La modelación de los campos de  $\text{SO}_2$  se hace utilizando un modelo offline, de manera que primero se generan los campos meteorológicos que luego alimentan el modelo de transporte. Los campos meteorológicos se calcularon utilizando el modelo *High Resolution Limited Area Model* (HIRLAM) (Undén et al., 2002) con una resolución horizontal de  $0.1^\circ \times 0.1^\circ$  ( $\sim 10\text{km} \times 10\text{km}$ ) y 60 niveles en coordenadas híbridas para la altura. El dominio utilizado es desde  $40.9^\circ\text{S}$  hasta  $15^\circ\text{S}$  y  $82.7^\circ\text{O}$  hasta  $63^\circ\text{O}$ . Los campos de HIRLAM alimentan el modelo *Atmospheric Transport and Chemistry Model* (MATCH) (Robertson et al., 1999) con la misma resolución horizontal del modelo meteorológico pero considerando sólo 37 niveles verticales de los 60 de HIRLAM. El dominio utilizado para el modelo de transporte es menor y abarca desde  $38^\circ\text{S}$  hasta  $30^\circ\text{S}$  y  $74^\circ\text{O}$  hasta  $68^\circ\text{O}$ . El detalle de las emisiones y la configuración de los modelos se encuentra en el Capítulo 4.

Una vez calculados los campos de azufre en el período de estudio se realizó una validación de los datos modelados utilizando estaciones de medición en la zona central. Si bien el objetivo principal del trabajo no está concentrado en una validación rigurosa de los resultados obtenidos, es necesario saber si hay un funcionamiento correcto del modelo, para ellos se comparan los valores de variables meteorológicas (e.g. Temperatura) y  $\text{SO}_2$  del modelo con los valores medidos en estaciones superficiales y radiosondeos. Para la validación meteorológica se utilizan los perfiles medidos por radiosondas en la estación Santo Domingo que lanzan diariamente a las 12 UTC (8 A.M. en hora local) y se pueden descargar desde el sitio web de la Universidad de Wyoming (<http://weather.uwyo.edu/upperair/>). También se consideraron las mediciones de  $\text{SO}_2$  en las estaciones de superficie, ubicadas en la Región del Libertador. Los datos de las estaciones se pueden descargar desde el sitio web del Sistema de Información Nacional de Calidad de Aire (SINCA, página web: <http://sinca.mma.gob.cl>). En el caso de la validación meteorológica se utiliza una comparación visual de los perfiles modelados y medidos. Para el caso de las mediciones de  $\text{SO}_2$  se obtienen gráficos de dispersión y se calculan regresiones entre los datos horarios y además se calculan ciclos diarios en las estaciones y se comparan con los ciclos diarios del modelo. Es importante mencionar que actualmente en la zona central de Chile no existen mediciones de perfiles de  $\text{SO}_2$ , lo que no permite una evaluación en altura de los datos modelados.

Luego de calcular los perfiles, se calcula el Factor de Masa Atmosférico (AMF) utilizando el modelo de transferencia radiativa, *Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer* (LIDORT) (Spurr et al., 2000). El AMF se calcula utilizando la formulación propuesta

por Palmer et al. (2001):

$$AMF = \int_0^1 \omega(\sigma)S(\sigma)d\sigma \quad (2.1)$$

donde la función  $\omega(\sigma)$ , denominada función de peso, se calcula utilizando el modelo de transferencia radiativa. Para ello se utiliza un código escrito en **Fortran 77** y que fue creado en el trabajo de Palmer et al. (2001). Para este trabajo se adaptó el código para que pudiera leer perfiles calculados con MATCH ya que originalmente estaba diseñado para leer perfiles del modelo global GEOS-Chem. Este código utiliza los siguientes parámetros de entrada: albedo, perfil de SO<sub>2</sub>, perfil de O<sub>3</sub>, ángulo cenital solar (SZA), ángulo de visión del satélite (VZA), nubosidad y perfil de aerosoles. Dado que el enfoque del trabajo está en verificar la sensibilidad que existe de las mediciones con respecto al perfil de SO<sub>2</sub>, la función de peso se calcula conservando los valores medidos por el satélite para las variables SZA y VZA. El albedo que se utiliza corresponde al valor original con el cual se calcula el AMF operacional, es decir albedo=5%. Para el ozono, se utiliza un perfil medido en EE.UU. pero modulado utilizando la misma cantidad total que se utiliza en el AMF operacional: 325 Unidades Dobson. En este trabajo no se consideraron aerosoles, al igual que en el cálculo del valor original del AMF. Es importante recalcar que el AMF se calcula en donde haya mediciones OMI. Para verificar la variabilidad del AMF en la central de Chile se calcula el promedio considerando sólo los valores donde la carga estimada con MATCH supera el valor de 0.01. La elección de este número corresponde a un umbral para valores significativos de la columna total de SO<sub>2</sub>. Los detalles tanto de la formulación del AMF y del modelo de transferencia radiativa utilizado (LIDORT) se encuentran en el Capítulo 5.

Para calcular la corrección de la estimación satelital de carga de SO<sub>2</sub> ( $\Omega_v(\text{corregido})$ ), se utiliza la estimación de AMF calculada con el modelo LIDORT ( $AMF_{\text{corregido}}$ ) en conjunto con la estimación operacional ( $\Omega_v(\text{operacional})$ ), a través de la formulación sugerida en Krotkov et al. (2008):

$$\Omega_v(\text{corregido}) = \frac{0,36}{AMF_{\text{corregido}}} \Omega_v(\text{operacional}) \quad (2.2)$$

Para resumir los pasos a completar en la metodología hasta la corrección de la señal satelital, la figura 2.1 muestra un esquema de las formulaciones utilizadas y de los datos de entrada utilizados en el modelo de transferencia radiativa.

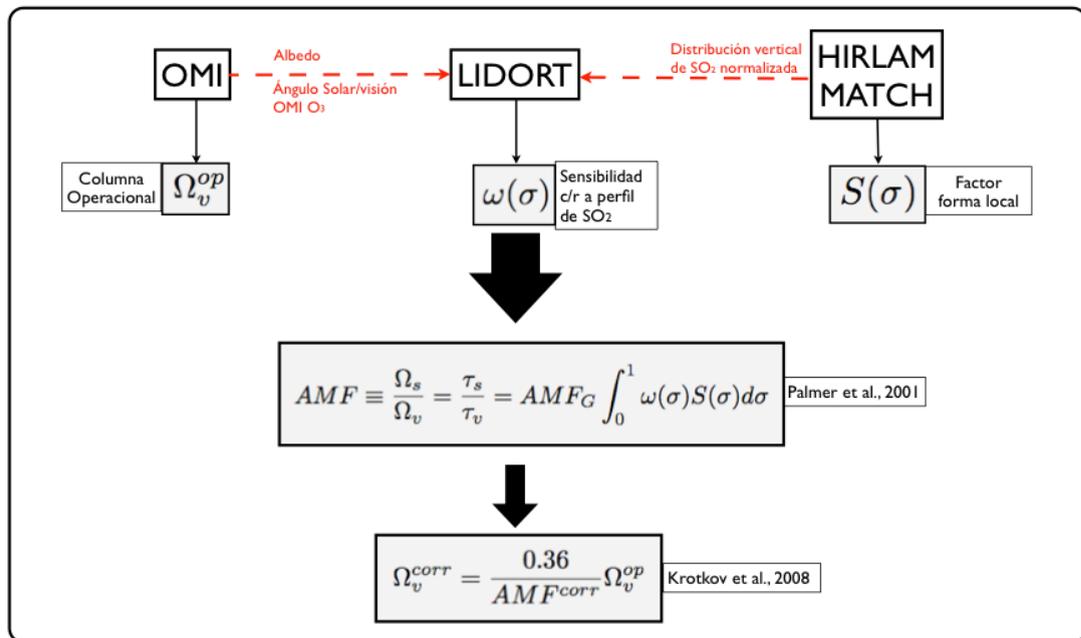


Figura 2.1: Esquema de la metodología para calcular el AMF utilizando combinadamente un modelo de transferencia radiativa y un modelo de transporte de contaminantes

Luego, los datos son filtrados estadísticamente. Primero se eliminan los datos fuera de rango eliminando aquellos valores bajo el percentil 1 y sobre el percentil 99. Luego de esto se procede a eliminar el ruido de fondo, siguiendo el trabajo de Carn et al. (2007). Primero se escoge una zona del Océano Pacífico, que en este caso corresponde a  $-36^\circ\text{S}$  hasta  $-33^\circ\text{S}$  en latitud y  $-95^\circ\text{O}$  hasta  $-90^\circ\text{O}$  en longitud. Con esta zona se estima un valor promedio para cada tiempo, que luego es sustraído a la señal completa en toda la región. La segunda parte de este filtro corresponde a un análisis espectral de la serie de tiempo, el objetivo es eliminar frecuencias que a priori corresponden a ruido. Lo primero que calculamos es la función potencia. Dada una serie de tiempo  $(X_t)_{t \geq 0}$ , y denominando su transformada de Fourier por  $T_f$ , la función potencia,  $P(X_t)$ , corresponde a:

$$P(X_t) = T_f(X_t) \cdot \text{conj}\{T_f(X_t)\} \quad (2.3)$$

donde  $\text{conj}(\cdot)$  corresponde al conjugado de dicho valor. Con esta función cuyo dominio se encuentra en el espacio de frecuencias, a priori consideramos que las frecuencias normalizadas mayores a 0.7, correspondiente a la variabilidad de treinta días de la serie. En este caso la eliminación de dichas frecuencias es aceptable dado que el tiempo de residencia del  $\text{SO}_2$  en la capa límite es del orden de días. Después de eliminar las frecuencias, se calcula la transformada de Fourier inversa y con ello se reconstruye la serie. Se analiza el impacto de la inclusión del filtro de Fourier. Una vez que han sido calculados los datos corregidos y posteriormente corregidos, se analizan los resultados realizando el mismo procedimiento pero en orden inverso. De esta manera se busca entender si existen diferencias en el orden de aplicación tanto de la corrección como del filtrado y verificar si el procedimiento es robusto. La comparación de la estimación original con respecto a la estimación corregida por los perfiles de  $\text{SO}_2$  a través del AMF y el filtro estadístico, se hacen calculando el promedio y la desviación estándar en la zona central de Chile.

# Capítulo 3

## Percepción remota de SO<sub>2</sub>

### 3.1. Antecedentes

En este trabajo se utilizarán las estimaciones de la columna vertical del instrumento OMI, pero antes se revisaran las estimaciones realizadas por otros instrumentos actualmente, para poder explorar y comparar las ventajas y desventajas de los distintos productos satelitales. Las estimaciones de este compuesto utilizando información satelital, se remontan al año 1982, con la erupción del volcán el Chichón en México, que produjo una perturbación sobre las zonas aledañas al volcán en las mediciones de ozono del instrumento *Total Ozone Mapping Spectrometer* (TOMS) (Krueger et al., 2008, 1995). Esto se produce debido a que ambos compuestos comparten líneas de absorción en la zona UV del espectro, tal como se muestra en la figura 3.1a. Además el algoritmo de obtención de ozono para TOMS, no consideraba otro agente de absorción en las longitudes de onda UV (Krueger et al., 2008). Este hecho marca el desarrollo del primer algoritmo para la obtención de dióxido de azufre utilizando el instrumento TOMS (Krueger et al., 1995). Con este algoritmo se pudo monitorear las erupciones volcánicas posteriores a la erupción del Chichón e incluso permitió la generación de una serie temporal con la cantidad de SO<sub>2</sub> ingresada a la atmósfera por erupciones volcánicas (Carn et al., 2003). Más adelante, aparecieron nuevos instrumentos de medición de retro-dispersión en la banda UV, con mejoras instrumentales en términos de cobertura global y resolución. Las mediciones son entregadas en carga de SO<sub>2</sub> ( $\Omega_v$ ) en unidades Dobson, que corresponde a la cantidad de moléculas que hay en una columna de dióxido de azufre al comprimirla en condiciones normales de presión y temperatura, equivalentemente  $2,69 \times 10^{16}$  *moleculas/cm<sup>2</sup>*. La fórmula de la carga es posible describirla en términos de un perfil vertical de SO<sub>2</sub> denominado  $C_{SO_2}(z)$  en unidades de moléculas por centímetro cúbico. Con estos datos la carga para un punto de medición en unidades Dobson (DU) corresponde a:

$$\Omega_v = \frac{1}{2,69 \times 10^{16}} \int_0^{Z_{top}} C_{SO_2}(z) dz \quad (3.1)$$

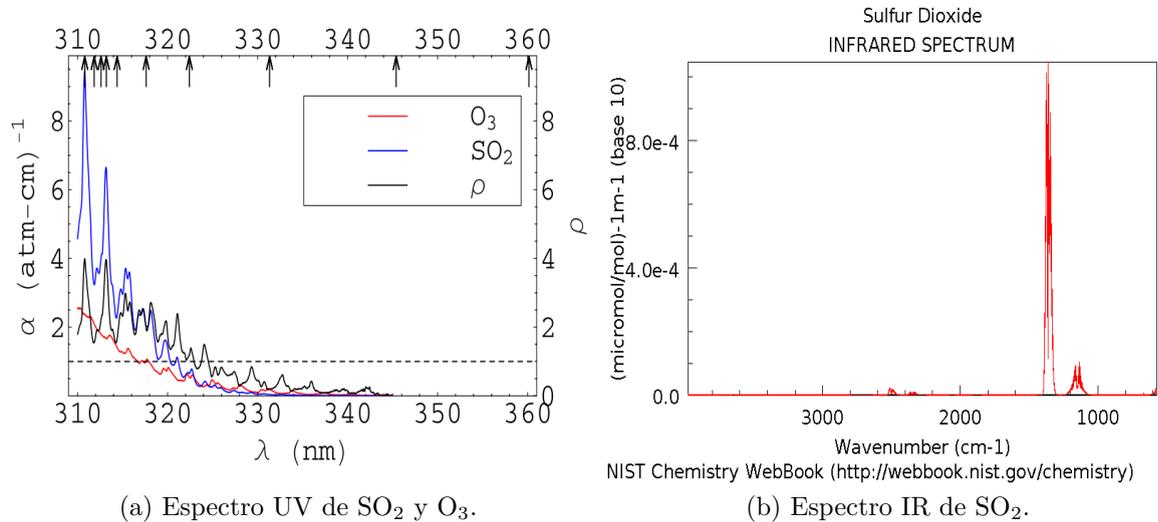


Figura 3.1: El panel (a) muestra el coeficiente de absorción de SO<sub>2</sub> y O<sub>3</sub> en la zona UV, además se muestra el valor de la razón entre ellos ( $\rho = SO_2/O_3$ ). Las flechas en la parte superior del gráfico muestran las líneas en las cuales OMI mide (Yang et al., 2007). El panel (b) muestra el coeficiente de absorción de SO<sub>2</sub> para número de onda infrarrojas. Los máximos que se observan son utilizados para el cálculo de carga con IASI (Clarisse et al., 2008). Figura obtenida del National Institute of Standards and Technology (NIST).

La tabla 3.1 muestra un resumen de las características de los instrumentos que actualmente monitorean dióxido de azufre en las bandas UV e IR (ver figuras 3.1a y 3.1b). Cabe destacar que la puesta en marcha del instrumento OMI fue para continuar con la misión de monitoreo de ozono de TOMS, que se inicia el año 2004. Este resumen permite apreciar las diferencias entre cada uno de los instrumentos que proveen datos de dióxido de azufre en la atmósfera actualmente. Notamos que la mayoría de estos instrumentos tienen una resolución espectral parecida, las diferencias surgen en el tamaño del pixel, cobertura global y más importante, en el ruido que estos datos contienen. Dependiendo el caso de estudio estas diferencias cobran importancia, por ejemplo, si se quiere medir la cantidad de azufre oxidado que ingresa a la atmósfera por una erupción volcánica estos cuatro instrumentos pueden ser utilizados (ver tabla 3.1). Los siguientes trabajos corresponden a estudios de erupciones volcánicas utilizando la información de los cuatro aparatos: la erupción del volcán Kasatochi medida con OMI (Krotkov et al., 2010); las erupciones desde 1996-2002 medidas con GOME-2 (Khokar et al., 2005); sistema de alerta de emisiones volcánicas para aviones creado por el SACS (Support to Aviation Control Service), utilizando la información disponible en SCIAMACHY; la erupción en Jebel at Tair con IASI (Clarisse et al., 2008). Más complejo es el caso de monitorear las emisiones antrópicas, como por ejemplo fundiciones de cobre o volcanes en estado de desgasificación, debido a la baja cantidad emitida y el corto tiempo de residencia, en comparación con una erupción (Carn et al., 2007; Krotkov et al., 2006). En este escenario, OMI tiene mejores características que los otros dos instrumentos, considerando que el ruido de las mediciones es de un orden de magnitud menor (Carn et al., 2007) en comparación con los demás instrumentos. Además al tener cobertura global diaria permite un monitoreo constante de las fuentes, en las que incluso se podría estimar la variabilidad diaria de la

fuente (Carn et al., 2007). Se sabe que IASI también tiene capacidad para medir en capa límite, pero en este caso al ser mediciones en IR, están altamente influenciadas por el perfil de vapor de agua, lo que agrega una dificultad adicional (Clarisse et al., 2008). Por ahora los datos de IASI son utilizados principalmente para altas cantidades de SO<sub>2</sub> (> 2 DU) y enfocado principalmente en erupciones volcánicas (Clarisse et al., 2008), por lo que se descarta su uso en el presente trabajo.

Tabla 3.1: Resumen de características de instrumentos satelitales que actualmente miden SO<sub>2</sub>. La información proviene de las páginas de cada instrumento (SCIAMACHY y GOME), Levelt2006 para OMI y Clerbaux2009 para IASI/MetOp. N.R.: No Reporta.

Mediciones UV							
Instrumento	Satélite	Pixel	Años	Cob. Global	Long. de onda	Res. espectral	Ruido
<i>unidades</i>		<i>km</i>			<i>nm</i>	<i>nm</i>	DU
<b>GOME</b>	ERS-2	40 × 320	1995-2004	3 días	[240, 790]	0.2-0.4	5
<b>SCIAMACHY</b>	ENVISAT	30 × 60	2004-actual	6 días	[220, 2400]	0.25- 0.4	5
<b>OMI</b>	EOS-AURA	13 × 24	2004-actual	1 día	[270, 500]	0.42-0.45-0.63	0.2
Mediciones Infrarojo							
Instrumento	Satélite	Pixel	Años	Cob. Global	Long. de onda	Res. espectral	Ruido
<i>unidades</i>		<i>km</i>			<i>cm<sup>-1</sup></i>	<i>cm<sup>-1</sup></i>	DU
<b>IASI</b>	MetOp	12 × 12	2008-actual	2 × día	[645, 2760]	0.3-0.5	N. R.

Todos los instrumentos aquí mencionados miden la radiación retro-dispersada proveniente de la tierra, utilizando geometría de tipo nadir tal como se muestra en la figura 3.2a<sup>1</sup>. Al medir en longitudes de onda UV, se sabe que los principales compuestos que absorben son el Ozono y el dióxido de azufre (figura 3.1a) por lo que los algoritmos comparan la radianza terrestre versus la irradianza solar medida, es decir comparan los espectros obtenidos desde la tierra y desde el sol, tal como se muestra en la figura 3.2b. Posteriormente se busca la cantidad de O<sub>3</sub> y SO<sub>2</sub> que mejor ajuste esta diferencia. Por ejemplo el producto de SO<sub>2</sub> de GOME utiliza el denominado algoritmo *Differential Optical Absorption Spectroscopy* (DOAS) que ajusta el espectro medido de la tierra en base a la cantidad de SO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> y otros procesos radiativos como el hecho de que la profundidad de las líneas de Fraunhofer, son menores cuando se considera la radiación solar dispersada comparada con

<sup>1</sup>En adelante sólo utilizaremos la descripción de las mediciones considerando la zona UV para facilitar la redacción.

la observada en radiación directa, fenómeno conocido como el efecto anillo (Eisinger and Burrows, 1998). Se destaca que la cantidad ajustada y estimada corresponde a aquella por la cual el rayo de luz solar (lineas  $a$  y  $b$  en rojo, figura 3.2a) llega al satélite y no a la columna vertical (línea azul, figura 3.2a), por ello resulta necesario la definición de un factor que transforme estas columnas inclinadas en estimaciones de columnas verticales, dicho factor se denomina *Factor de Masa Atmosférico* (AMF, en inglés). Este factor es fuertemente dependiente del perfil de dióxido de azufre y el albedo superficial entre otras cosas.

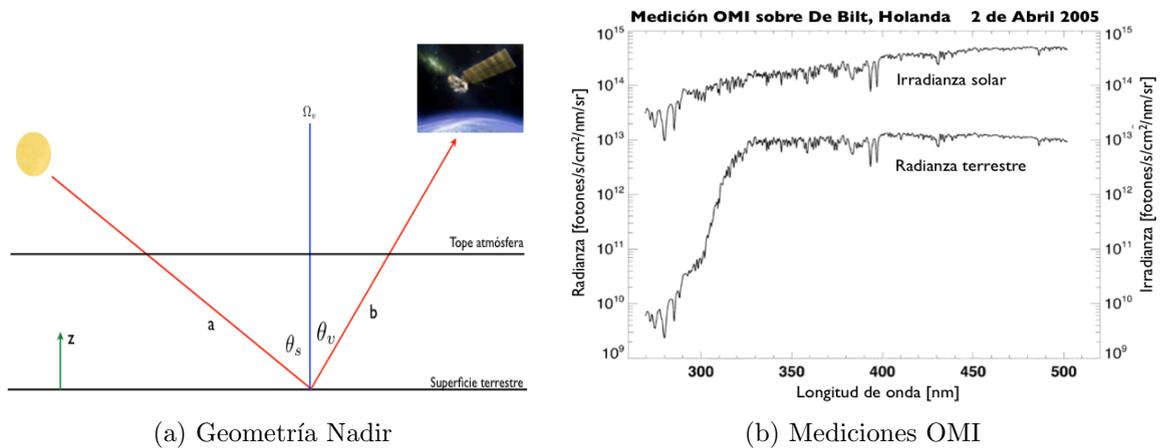


Figura 3.2: El panel de la izquierda muestra un esquema simplificado de la geometría de tipo nadir utilizada para la medición. Los ángulos  $\theta_s$  y  $\theta_v$  corresponden al cenit solar y de visión satelital respectivamente. El panel de la derecha muestra la radianza terrestre y la irradianza solar medida por OMI sobre Holanda para el 2 de abril del 2005. Adaptado de Levelt et al. (2006).

## 3.2. Instrumento de Monitoreo de Ozono

El Instrumento de Monitoreo de Ozono (OMI) es un espectrómetro hiperespectral que se encuentra a bordo del satélite AURA de la NASA. Este instrumento fue desarrollado por la *Agencia Holandesa para programas aeroespaciales* (NIVR) en conjunto con el *Instituto de Meteorología Finlandés* (FMI). La función principal de este aparato es el monitoreo del ozono ( $O_3$ ) global, continuando la misión del instrumento TOMS desde el 2006. En principio, las mediciones de radiación obtenidas por este satélite corresponden a mediciones en la zona UV-visible en el intervalo [270, 500] nm. Las longitudes de onda que se utilizan para la obtención de la columna vertical de OMI provienen de la zona UV-2, dada por el intervalo [310, 365] nm (Levelt et al., 2006).

Tal como se mencionó en la sección anterior OMI es un instrumento que utiliza la visión tipo nadir para la toma de mediciones de intensidad. La geometría de este tipo de mediciones, se muestra en la figura 3.2a. El principio básico de este tipo de mediciones consiste en medir primero la irradianza solar y compararla con la intensidad retro-dispersada en la atmósfera terrestre (Liou, 2002, ver figura 3.3). Como estamos midiendo en el rango UV, el principal compuesto que absorbe corresponde al ozono y que además es abundante comparado con la cantidad de SO<sub>2</sub>, lo que supone un desafío mayor en la obtención de

esta estimación (Krotkov et al., 2006).

Para la obtención de las mediciones de  $\text{SO}_2$  se utilizan dos algoritmos que dan lugar a cuatro productos con información de la carga de azufre en la atmósfera, que dependen de la altura a la cual se concentra el compuesto. Para las mediciones a baja altura como en la capa límite se utiliza el Algoritmo de Diferencias de Bandas Residuales (BRDA, en inglés) (Krotkov et al., 2006), el nombre técnico de este producto es OMSO2-PBL, que permite rastrear fuentes antropogénicas. Los otros productos de azufre oxidado son utilizados para obtener datos sobre la desgasificación y erupción de volcanes. En esta categoría se encuentra información para la tropósfera baja (OMSO2-TRL), tropósfera media (OMSO2-TRM) y para la tropósfera alta y estratósfera (OMSO2-STL), que utilizan el algoritmo de Ajuste Lineal (LF, en inglés) (Yang et al., 2007). En este trabajo, nuestro interés está en la señal de una fuente antrópica para la zona centro de Chile por lo que debemos tomar en cuenta los datos tipo PBL (Planetary Boundary Layer, en inglés), tal como se recomienda en la descripción de este producto.

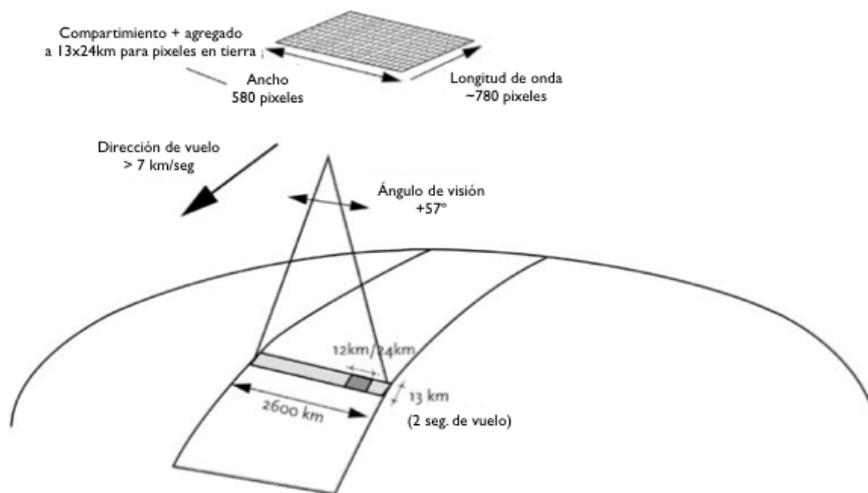


Figura 3.3: Esquema de la geometría de las mediciones satelitales de OMI, se aprecia el tamaño del pixel y el largo máximo de medición (2600 km), la velocidad de movimiento y el ángulo de extensión ( $57^\circ$ ). Adaptado de Levelt et al. (2006).

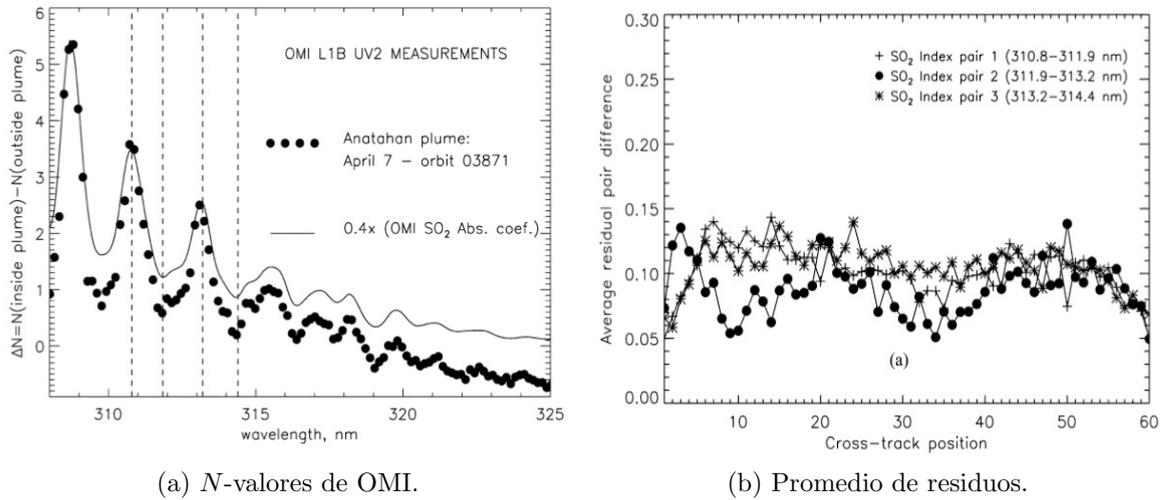
Ambos algoritmos se inician con un paso de linealización, en el cual sólo se estima inicialmente la cantidad de ozono y la reflectividad (sin considerar presencia de SO<sub>2</sub>) utilizando el método con el que TOMS procesaba antiguamente los datos, en el cual se utilizan dos longitudes de onda (317.5 y 331.2 nm). Posterior a este paso se calculan residuos para 10 longitudes de onda, como la diferencia entre los valores medidos y calculados en forma de  $N$ -valores ( $N = -100 \cdot \log_{10}(I/F)$ , donde  $I$  es la radianza terrestre y  $F$  es la irradianza solar). En este caso cada  $N$ -valor considera los efectos de dispersión múltiple, reflectividad, absorción de ozono y azufre oxidado entre otros.

Long. de onda BRD	
Par $j$	$\lambda_j^{short} - \lambda_j^{long}$
$P_1$	310.8 - 311.9
$P_2$	311.9 - 313.2
$P_3$	313.2 - 314.4
$P_B$	317.6 - 331.3

Tabla 3.2: Pares de longitudes de onda utilizados en el algoritmo BRD para estimar la cantidad de SO<sub>2</sub>. Adaptado de Krotkov et al., 2006.

En presencia de SO<sub>2</sub> estos residuos tienen una estructura espectral que tiene correlación con la sección de corte de absorción del compuesto, lo que se puede apreciar en la figura 3.4a (Krotkov et al., 2006). Esta figura contiene los valores diferenciados de píxeles sobre una nube de SO<sub>2</sub> y sobre un pixel limpio (puntos negros), la línea continua corresponde a la sección de corte de absorción del SO<sub>2</sub> escalada para poder compararlos, mostrando esta correlación en las series. Se sabe también que estos residuos contienen contribuciones de otras fuentes que aún no son identificadas (Documentación OMI), por lo que para reducir esta interferencia, se calcula una mediana de los residuos para un grupo de escenas sin SO<sub>2</sub> y sin nubosidad (fracción nubosa menor a un 15%), que cubren una latitud de  $\pm 15^\circ$  a lo largo de la posición de la órbita, que posteriormente es sustraída para cada banda espectral y cada posición longitudinal (Yang et al., 2007). Los residuos con los valores de estas medianas sustraídos, se denominan residuos corregidos.

El algoritmo BRDA utiliza los residuos corregidos en tres pares de longitudes de onda ( $P_1$ ,  $P_2$  y  $P_3$  que se muestran en la tabla 3.2). Estos cuatro valores se muestran con una línea punteada vertical en la figura 3.4a y que corresponden a aquellos con la mayor diferencia en la sección de corte, de manera tal de poder maximizar la sensibilidad a las emisiones antrópicas en la capa límite. Es también importante destacar que la absorción en esta región está dominada por el ozono; si bien ambos absorben en las mismas longitudes de onda, la diferencia está en la cantidad de estos compuestos presentes en la atmósfera. Esto es posible verlo en la figura 3.4b, donde los valores son bajos, por lo que las estimaciones de dióxido de azufre están condicionadas por la cantidad de ozono.

(a)  $N$ -valores de OMI.

(b) Promedio de residuos.

Figura 3.4: El panel (a) nos muestra la diferencia de  $N$ -valores medidos por OMI de pixeles de una pluma volcánica de SO<sub>2</sub> y pixeles limpios (puntos negros), superpuestos a la sección de corte de SO<sub>2</sub> (línea continua). Las líneas verticales muestran los 4 valores de longitud de onda utilizados para la estimación de carga de SO<sub>2</sub>. Krotkov et al., 2006. Mientras que el panel (b) muestra los promedios de residuos de los pares 1, 2 y 3 utilizados por OMI para la estimación de carga de SO<sub>2</sub>, en la zona  $\pm 20$  en latitud y para cada posición de medición del satélite, durante el 28 de marzo del 2005. Krotkov et al., 2006.

Finalmente para obtener las mediciones de SO<sub>2</sub>, es necesario recordar que la intensidad de radiación retro-dispersada observada por el satélite se encuentra inclinada con respecto a lo que se quiere obtener, ver figura 3.2a, por lo que cada par residual utilizado (ver tabla 3.2), es primero convertido a una columna inclinada de SO<sub>2</sub>, utilizando como referencia la sección de corte de absorción a temperatura constante (275 K) obtenida en Bogumil et al. (2003). Finalmente se utiliza el AMF para convertir estas mediciones, que están en un ángulo, en estimaciones de columna vertical de SO<sub>2</sub>.

# Capítulo 4

## Simulación de la dispersión de azufre oxidado

### 4.1. Modelación

Para tener una representación local de la distribución vertical de  $\text{SO}_2$  se utiliza un modelo regional de transporte. De acuerdo a Jacob (1999), la concentración de las especies químicas en la atmósfera esta controlada por cuatro procesos: emisiones, química, transporte y deposición. Estos procesos se traducen en la llamada ecuación de continuidad (ecuación 4.1) (Gallardo, 2006, cap. 4), que representa el balance entre las variaciones temporales de la concentración de un compuesto (denominada  $c$ ) y los procesos enunciados anteriormente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + c \cdot \nabla \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla c + \nabla \cdot \langle v'c' \rangle + L = E \quad (4.1)$$

Donde:

- $c$ : concentración del compuesto
- $v$ : Velocidad del viento
- $L$ : Sumideros
- $E$ : Fuentes

El término  $\vec{v} \cdot \nabla c$  representa la advección de la masa por efecto del viento promedio, mientras que el termino  $\nabla \cdot \langle v'c' \rangle$  representa la divergencia del flujo turbulento y donde  $\langle \rangle$  representa promedio y  $(v', c')$  representan las variaciones de las respectivas cantidades con respecto al promedio, finalmente el término  $c \cdot \nabla \vec{v}$  representa la difusión pero se desprecia generalmente pues se considera que el viento es un fluido incompresible ( $\nabla \vec{v} = 0$ ). Además si se quiere obtener solución, se deben agregar las condiciones de borde y las condiciones iniciales. Por ello resulta importante tener una representación del viento en este caso, pues representa el transporte del compuesto. Para ello se utiliza un modelo meteorológico cuyos campos alimentan el modelo de transporte de contaminantes. Para este trabajo se utilizó el *High Resolution Limited Area Model* (HIRLAM) (Undén et al.,

2002) para la meteorología y el *Atmospheric Transport and Chemistry Model* (MATCH) (Robertson et al., 1999) para la modelación de campos de concentración de  $\text{SO}_2$ .

HIRLAM (Undén et al., 2002) es un modelo hidrostático. HIRLAM es utilizado como una herramienta para reducir la escala de los procesos meteorológicos de manera dinámica obteniendo mayor resolución tanto temporal como espacial, de variables meteorológicas importantes para la dispersión como los vientos. En este trabajo consideramos una configuración similar a la que ha sido utilizada en el trabajo de Huneus et al. (2006) considerando condiciones de borde cada 6 horas del ECMWF (European Centre for Medium-range Weather Forecast, en inglés) y una resolución horizontal de  $0.1^\circ \times 0.1^\circ$  ( $\sim 10\text{km} \times 10\text{km}$ ) y 60 niveles en coordenadas híbridas para la altura. El dominio utilizado corresponde a  $40.9^\circ\text{S}$  hasta  $15^\circ\text{S}$  que se escoge de esta manera para que no influyan las condiciones de borde en el interior del dominio. El modelo se corre desde el 20 de Diciembre del 2005 hasta el 1 de Abril del 2006, de manera de tener 10 días previos utilizados como tiempo de ajuste.

Los campos meteorológicos de HIRLAM son utilizados como parámetros de entrada para MATCH (Robertson et al., 1999). MATCH es un modelo de transporte de tipo Euleriano, y al igual que HIRLAM fue configurado siguiendo el trabajo de Huneus et al. (2006). Las emisiones utilizadas están descritas en la sección 4.2 y recordamos que sólo se consideran fuentes puntuales. El dominio utilizado corresponde a  $38^\circ\text{S}$  hasta  $30^\circ\text{S}$  y  $74^\circ\text{O}$  hasta  $68^\circ\text{O}$  usando la misma resolución horizontal de HIRLAM y considerando sólo 37 de los 60 niveles verticales ( $\sim 500\text{hPa}$ ) de manera de tener datos de toda la tropósfera.

La química utilizada en la modelación corresponde a una versión simplificada en la que sólo se consideran dos reservorios de azufre, el  $\text{SO}_2$  (azufre oxidado) y el sulfato, que considera compuestos tanto en fase gaseosa (aerosoles de sulfato), como en fase líquida (ácido sulfúrico). Este esquema considera el proceso de oxidación de  $\text{SO}_2$  a sulfato en donde la tasa de reacción varía dependiendo de la hora y la latitud (Tarrason and Iversen, 1998). Esta dinámica incluye también la deposición seca para ambos compuestos y sólo deposición húmeda para el sulfato. La figura 4.1 muestra un esquema genérico incluyendo los procesos que ocurren de la química utilizada en esta modelación.

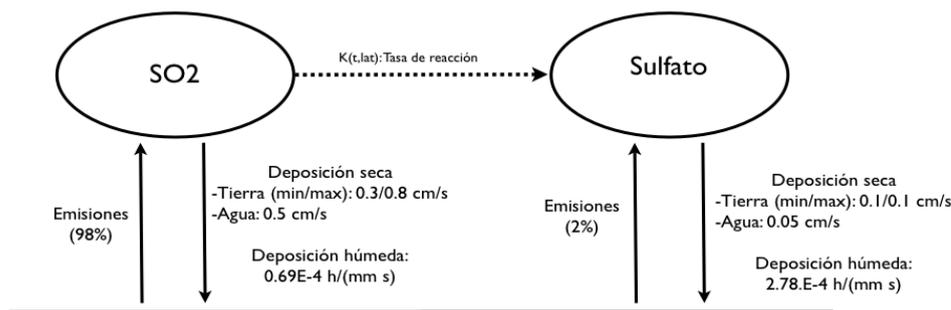


Figura 4.1: Esquema de la química utilizada para la modelación del azufre oxidado. También se muestran los porcentajes de emisión de cada compuesto y los valores de las velocidades de deposición seca (sobre tierra y agua) en  $\text{cm}/\text{s}$  y deposición húmeda en  $\text{h}/(\text{mm} \cdot \text{s})$ .

## 4.2. Emisiones

Dentro de la modelación un punto importante son las emisiones, pues controlan la cantidad que ingresa a la atmósfera del compuesto en estudio. Para el caso del azufre y en particular de la zona centro de Chile, se considera el inventario revisado y mejorado en el trabajo de Castillo (2011). Además para el esquema de química utilizado, se considera que un 98 % de las emisiones se hacen en forma de  $\text{SO}_2$  y el 2 % restante en forma de sulfato. A lo largo de la zona central de Chile existen fuentes naturales (volcanes y Dimetil Sulfuro (DMS)) y antrópicas (fundiciones, termoeléctricas), sin embargo, para efectos de este trabajo se utilizan sólo las fuentes puntuales de azufre, tomando en cuenta que además las emisiones de tipo urbanas y areales es posible despreciarlas (Castillo, 2011). El inventario considera fundiciones de cobre, termoeléctricas y fábricas de cemento y cerámica. Las fuentes más grandes son las fundiciones de cobre Caletones, Ventanas y Chagres seguido de las termoeléctricas Laguna verde y Ventanas. La tabla 4.1 muestra un resumen con las emisiones utilizadas en este estudio.

Tabla 4.1: Emisiones en Chile Central para la simulación de  $\text{SO}_2$

Fuentes	Emisiones, GgS/yr	
	$\text{SO}_2$ - S	$\text{SO}_4^{2-}$ - S
Fundiciones		
Caletones (34.08S, 70.45W, 1500 m.a.s.l.)	83.4	4.17
Ventana (32.73S, 71.48W, 10 m.a.s.l.)	16.6	0.8
Chagres (32.67S, 70.88W, 400 m.a.s.l.)	3.8	0.2
Termoeléctricas		
Laguna Verde (33.10S, 71.68W, 10 m.a.s.l.)	0.2	0.009
Ventana (32.73S, 71.48W, 10 m.a.s.l.)	5.3	0.3
Otras Fuentes		
Otros (Fabricas de cerámica y cemento)	8.6	0.4

## 4.3. Validación

### 4.3.1. Validación Meteorológica

La validación meteorológica se realiza utilizando los datos de radiosondas obtenidos del sitio web de la Universidad de Wyoming (<http://weather.uwyo.edu/upperair/>). Estos radiosondeos son lanzados a las 12 UTC (8:00 AM en tiempo local) desde Agosto de 1999 hasta el día de hoy. Sin embargo para el período de estudio entre Enero y Marzo del 2006 no existen sondeos entre el 1 y 25 de Febrero, por lo que en este caso, aquellos datos no son graficados.

La validación en el caso del modelo meteorológico, tal como se estableció en la metodología, compara los resultados de perfiles de variables meteorológicas medidas con los perfiles calculados con HIRLAM. Las figuras 4.2, 4.3, 4.4 y 4.5 muestran los perfiles obte-

nidos con HIRLAM a la izquierda versus el medido en Santo Domingo por la DMC para las variables temperatura, viento zonal, viento meridional y humedad específica respectivamente. Los gráficos están enfocados en los 4 primeros kilómetros ya que las estimaciones satelitales consideran esa altura como referencia.

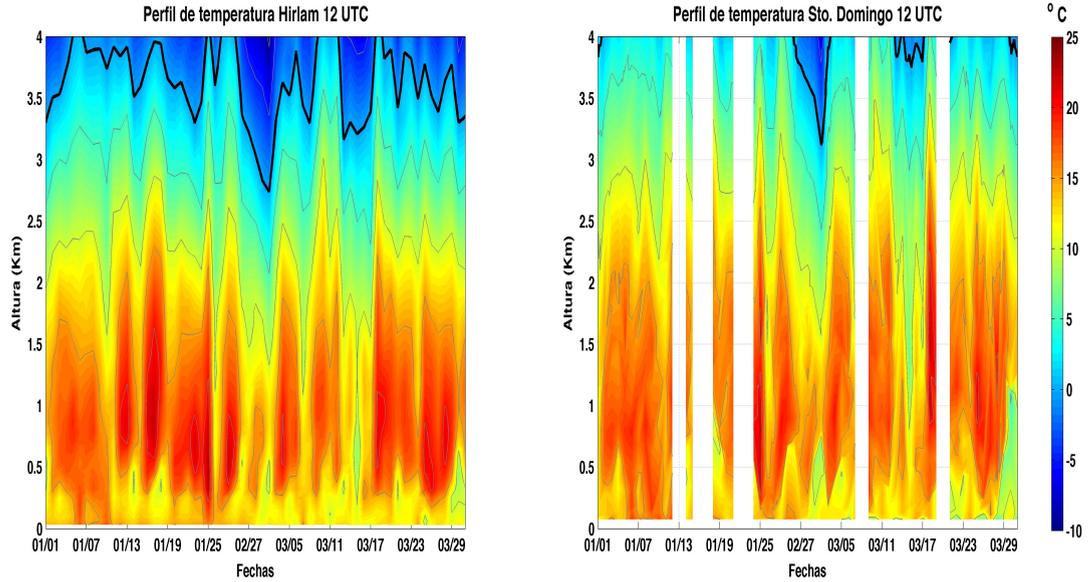


Figura 4.2: Temperatura en HIRLAM (Derecha) versus la temperatura medida en Santo Domingo. La línea negra demarca el contorno con valor cero.

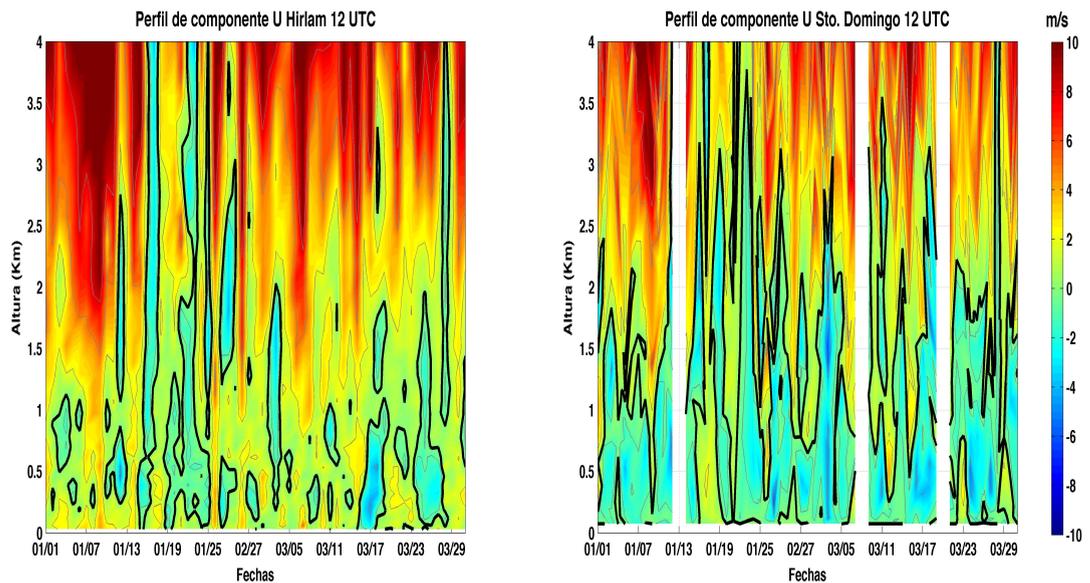


Figura 4.3: Componente zonal del viento en HIRLAM (Derecha) versus la componente zonal del viento medida en Santo Domingo. La línea negra demarca el contorno con valor cero.

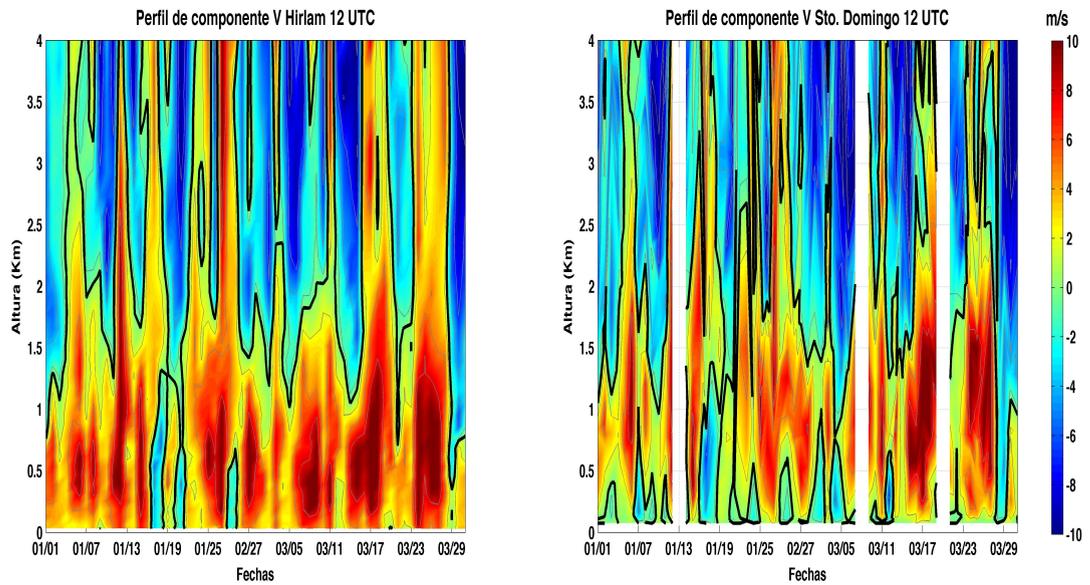


Figura 4.4: Componente meridional del viento en HIRLAM (Derecha) versus la componente meridional del viento medida en Santo Domingo. La línea negra demarca el contorno con valor cero.

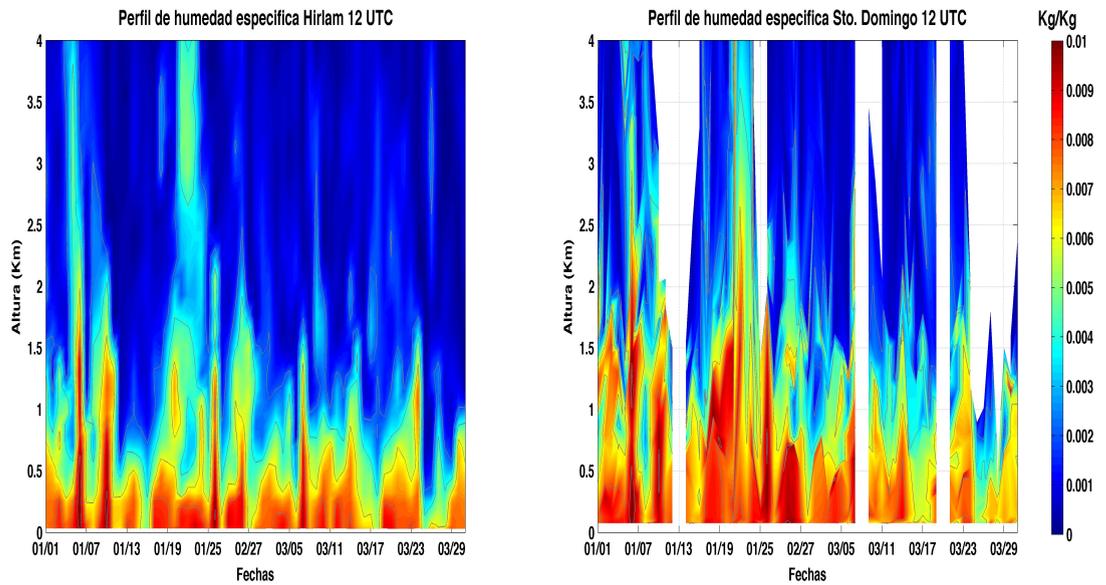


Figura 4.5: Humedad específica en HIRLAM (Derecha) versus la Humedad específica medida en Santo Domingo.

La validación utilizando los perfiles medidos en Santo Domingo muestran que la temperatura calculada por HIRLAM (High Resolution Limited Area Model) logra captar la escala sinóptica de los procesos (figura 4.2). Sin embargo es posible apreciar ciertas diferencias en las zonas más altas. De la misma forma es posible apreciar en la figura 4.3 y 4.4 que la representación del viento se asemeja a los valores medidos, sobre todo consi-

derando las zonas sobre 1 km, además se aprecia una componente meridional más fuerte en el modelo que la medida en Santo Domingo. Esto es posible explicarlo considerando la resolución de HIRLAM ( $\sim 10$ km) y que el lugar de medición es una zona cercana a la costa, por lo que el pixel con el cual se compara tiene una componente marítima, donde predomina el viento meridional lo que explica las diferencias en la zona baja para la componente meridional. La representación de la humedad específica también capta la escala sinóptica y no se logra apreciar mayores diferencias entre el valor modelado y el medido.

### 4.3.2. Validación de concentración de $\text{SO}_2$

Se validaron los datos de las concentraciones de  $\text{SO}_2$  medidos en superficie para verificar el funcionamiento del modelo de transporte MATCH. se utilizan las mediciones de las estaciones ubicadas en la región del Libertador General Bernardo O'Higgins que tienen observaciones para el período de estudio. Dichas estaciones son: Casa de Peuco, Cauquenes, Cipreses, Codegua, Coya Club, Coya Población, Rancagua y San Francisco de Mostazal. La distribución espacial de las estaciones es posible apreciarla en la figura 4.6. Los datos pueden ser descargados del sitio del Sistema de Información Nacional de Calidad de Aire (SINCA, página web: <http://sinca.mma.gob.cl>). La tabla 4.2 muestra un resumen de las estaciones utilizadas para la validación del modelo de transporte. La columna "Disponibles" contabiliza los valores horarios que hay desde el 1 de Enero hasta el 31 de Marzo del 2006 (2160 datos) excluyendo los valores 0 encontrados en la serie de tiempo y el valor 0.3817, que se repite sistemáticamente en las series.

Tabla 4.2: Estaciones de medición de  $\text{SO}_2$  en la región del Libertador General Bernardo O'Higgins.

Nombre	Lon	Lat	Disponibles (%)	Administrador
Codegua	-70.66	-34.03	100	Colbún S. A.
Cauquenes	-70.55	-34.24	48.1	Codelco
Cipreses	-70.46	-34.26	41.4	Codelco
Coya Club	-70.54	-34.2	46.6	Codelco
Coya Población	-70.53	-34.2	56.6	Codelco
Casas de Peuco	-70.64	-33.95	99.9	Colbún S. A.
San Francisco	-70.7	-33.98	100	Colbún S. A.
Rancagua	-70.71	-34.16	94.77	MMA (*)

(\*) Ministerio del Medio Ambiente, Chile

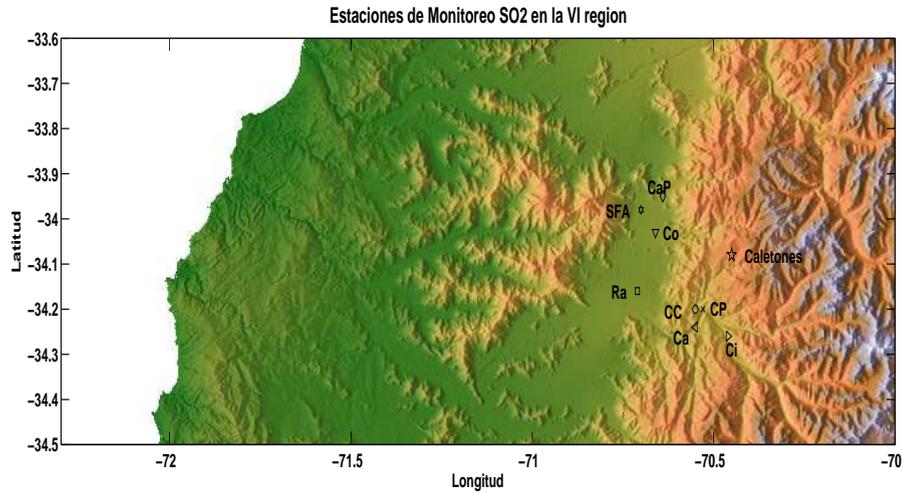
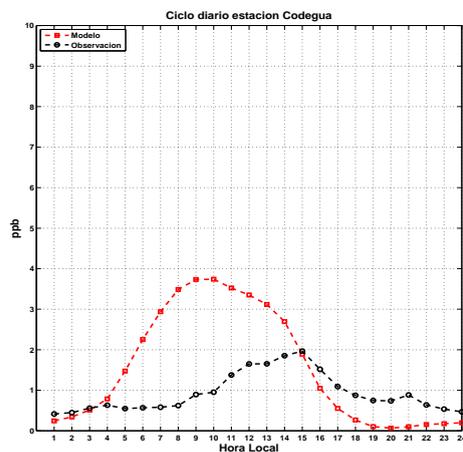
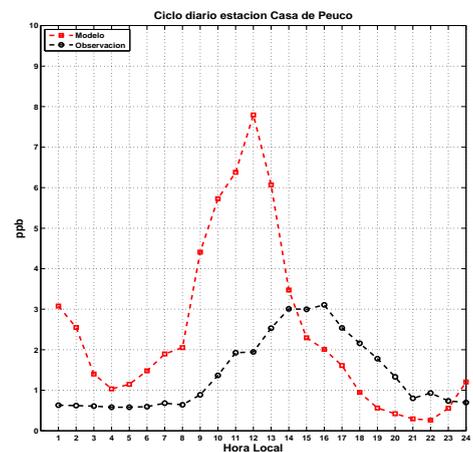


Figura 4.6: Localización de las estaciones de medición de  $\text{SO}_2$  ubicadas en la región del Libertador General Bernardo O'Higgins utilizadas para la evaluación de MATCH. El código para las estaciones es: CaP: Casa de Peuco; SFA: San Francisco de Mostazal; Co: Codegua; Ra: Rancagua; CC: Coya Club; CP: Coya Población; Ca: Cauquenes; Ci: Cipreses

Se analizó la estructura de los ciclos diarios de las concentraciones de  $\text{SO}_2$  obtenidos con el modelo y con las mediciones en las estaciones que no presentan datos anómalos, es decir sólo se calculan para las estaciones Codegua, Casa de Peuco, San Francisco y Rancagua. El caso de Rancagua muestra una subestimación del modelo, principalmente por que no estamos considerando las emisiones de la ciudad. Para las otras estaciones se ve que hay diferentes horas en las cuales se alcanza el máximo.

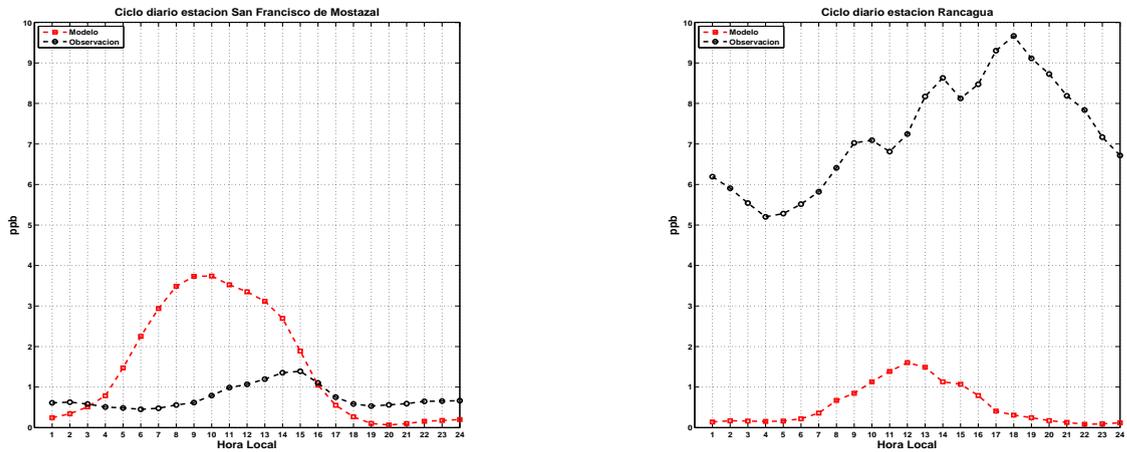


(a) Ciclo diario estación Codegua



(b) Ciclo diario estación Casa de Peuco

Figura 4.7: Ciclos diarios de las concentraciones de  $\text{SO}_2$  obtenida con el modelo (línea roja) y con las mediciones (línea negra) para el período de estudio. El panel 4.7a muestra el resultado en la estación Codegua y el panel 4.7b en la estación Casa de Peuco.



(a) Ciclo diario estación San Francisco

(b) Ciclo diario estación Rancagua

Figura 4.8: Ciclos diarios de las concentraciones de SO<sub>2</sub> obtenida con el modelo (línea roja) y con las mediciones (línea negra) para el período de estudio. El panel 4.8a muestra el resultado en la estación San Francisco y el panel 4.8b en la estación Rancagua.

La discrepancia que existe entre los datos de concentraciones de SO<sub>2</sub> al revisar los ciclos diarios y los datos horarios se debe a que las observaciones y la modelación han sido realizadas con distintos propósitos. En el caso de las observaciones la ubicación de estas se ha hecho en base a la ubicación de las fundiciones que se han colocado en la zona centro, siendo la excepción la estación Rancagua, que es administrada por el gobierno con el propósito de monitorear la calidad del aire de la ciudad de Rancagua. De esta manera las estaciones están colocadas en zonas donde la topografía es compleja y captan fenómenos de circulación locales que la resolución del modelo no puede captar. La figura 4.9 muestra la localización de las estaciones Coya Club y Coya población, que están muy cercanas y que aún así captan distintos fenómenos de circulación (Castillo, 2011; Gallardo et al., 2000). La figura 4.10 muestra la ubicación de las estaciones pero utilizando la topografía del modelo, donde se puede visualizar que a una escala horizontal de 10km, es posible apreciar sólo los cambios en altura que hay en la zona cordillerana y que por lo tanto los efectos captados localmente por las estaciones, no serán captados por el modelo en el respectivo pixel.

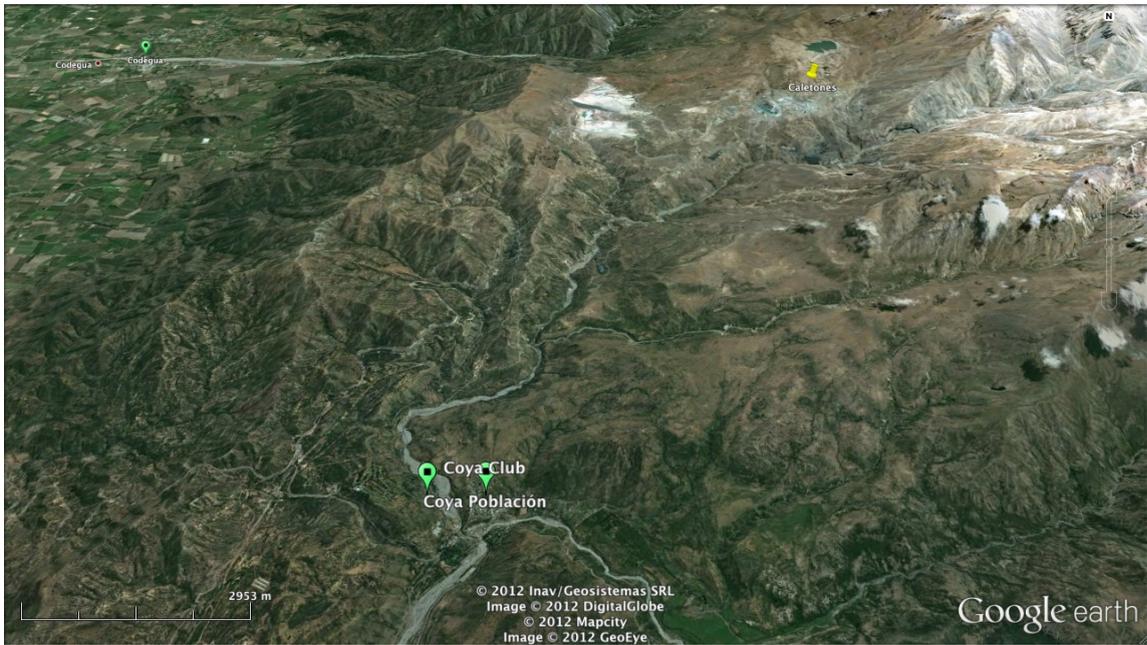


Figura 4.9: Localización de las estaciones Coya Club y Coya Población. Se aprecia también la fundición Caletones sobre el cerro. En este caso es posible ver que fundición abajo se encuentran ambas estaciones.

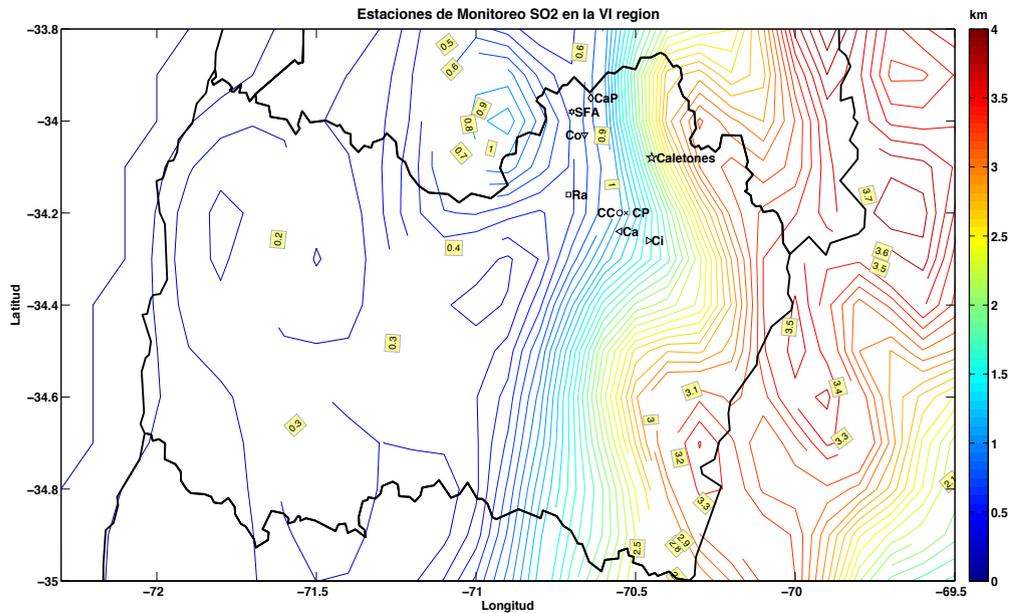


Figura 4.10: Topografía de MATCH en la sexta región. Se puede ver también la localización de las estaciones y de Caletones. También es posible apreciar que por la cercanía de algunas estaciones, el modelo capta la misma señal para ambos lugares. El código para las estaciones es: CaP: Casa de Peuco; SFA: San Francisco de Mostazal; Co: Codegua; Ra: Rancagua; CC: Coya Club; CP: Coya Población; Ca: Cauquenes; Ci: Cipreses

Los resultados presentados no son satisfactorios a la hora de evaluar los cálculos del modelo. Es por ello que es importante saber que las circulaciones de mesoescala están reproduciendo correctamente el modelo. Se sabe que durante el verano las circulaciones de mesoescala afectan las concentraciones de  $\text{SO}_2$ . El período de verano se caracteriza por cielos despejados y una fuerte insolación superficial, que están vinculados a la alta del Pacífico. De acuerdo a Gallardo et al. (2000) es posible apreciar esta circulación en los datos de la estación ubicada en Coya donde el ciclo diario de las concentraciones de  $\text{SO}_2$ , presenta un máximo durante la mañana, que refleja el efecto de los vientos que van desde la cordillera, donde está ubicada la fundición Caletones, hacia el interior de Chile, que es el lugar donde está la estación. Durante el día la situación es la opuesta, y la pluma es advectada hacia las montañas. La figura 4.11 muestra el promedio de concentraciones de  $\text{SO}_2$  para las 6, 12, 18 y 24 de hora local, las flechas indican el promedio del viento en el primer nivel del modelo para las mismas horas. En este caso es posible ver que entre la costa y la cordillera de los Andes, los vientos tienden a ir desde la cordillera hacia el interior y en las horas ya más avanzadas este efecto se invierte, tal como se esperaba.

Si bien los datos de Coya club se descartan debido a su bajo porcentaje de datos válidos, se presenta de igual forma el resultado del ciclo diario de concentración. La figura 4.12 muestra la comparación del ciclo diario de concentraciones de  $\text{SO}_2$  de la estación Coya Club (línea negra) y el modelo (línea roja). En la figura es posible apreciar que tanto el modelo como los datos presentan un máximo en la mañana, reflejando el tipo de circulación en torno a la montaña que existe en la zona. Si bien los órdenes de magnitud son similares, existen al menos tres variables que podrían afectar el resultado observado. El primer punto está con la calidad de los datos, que ha sido reportada como deficiente en el trabajo de Castillo (2011). Aunque en este caso es importante señalar que también podrían haber problemas con los datos modelados, ya que las emisiones consideradas son constantes y generalmente no lo son (Castillo, 2011) y segundo la resolución utilizada en la modelación, no permite captar los efectos locales de transporte que captan las estaciones de medición de  $\text{SO}_2$  en la región del Libertador General Bernardo O'Higgins. Finalmente se destaca que la modelación realizada es útil para el cálculo del AMF y verificar la sensibilidad de la señal de  $\text{SO}_2$ , puesto que el efecto de la cordillera no es posible verlo en un modelo de escala global como lo es GEOS-Chem (Bey et al., 2001) de acuerdo al trabajo realizado por Lee et al. (2009). Además dado que no existen mediciones de perfiles de  $\text{SO}_2$  en la zona Central de Chile, se impide verificar los resultados de los perfiles utilizados en la metodología. Sin embargo los perfiles de azufre oxidado calculados con un modelo, resultan ser una primera aproximación en la estimación de la sensibilidad de la estimación de  $\text{SO}_2$ .

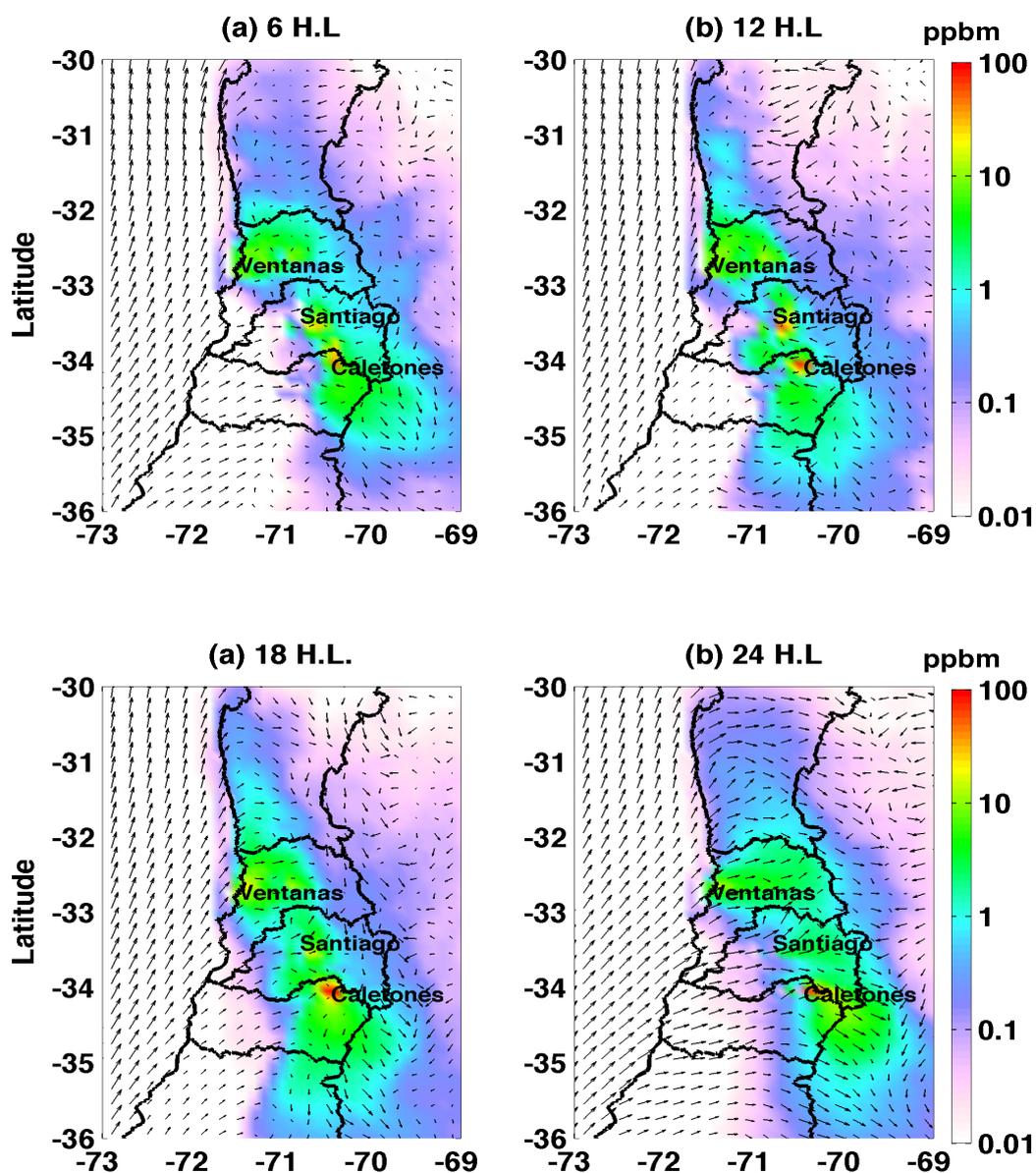


Figura 4.11: Promedios de concentraciones de  $\text{SO}_2$  y el viento en el primer nivel de MATCH a las 6, 12, 18 y 24 de hora local, paneles (a), (b), (c) y (d) respectivamente.

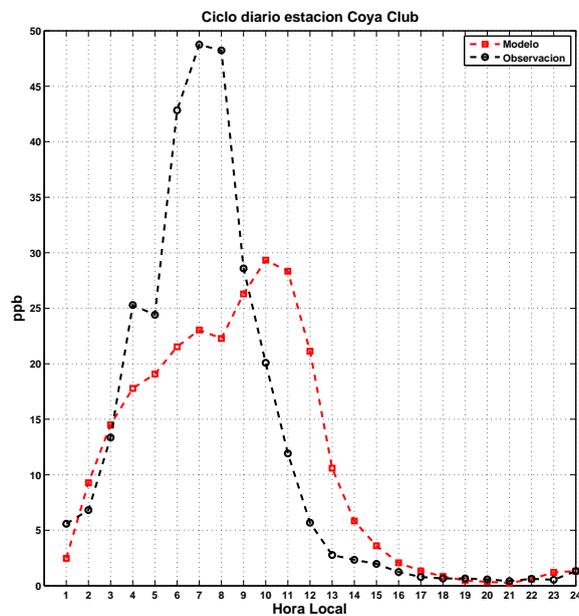


Figura 4.12: Ciclos diarios de las concentraciones de  $\text{SO}_2$  obtenida con el modelo (línea roja) y con las mediciones (línea negra) para el período de estudio en la estación Coya Club.

# Capítulo 5

## Transferencia Radiativa

La transferencia radiativa es el fenómeno físico por el cual la radiación electromagnética transfiere energía al entorno por el cual atraviesa. Para ello existen tres mecanismos: la absorción, la emisión y la dispersión. Estas interacciones se traducen en la llamada ecuación de transferencia radiativa que incluye la parametrización de estas tres interacciones. Dicha ecuación es compleja debido a que depende tanto de la longitud de onda que se estudia como de las propiedades del medio que está atravesando (Liou, 2002). Los dos fenómenos físicos que vale la pena mencionar en la percepción remota de especies químicas son el proceso de *absorción* y *dispersión*, que describen el comportamiento cuando un rayo de luz se ve afectada por una partícula (moléculas, aerosoles, etc.). La absorción corresponde al proceso mediante el cual un fotón (energía) penetra al sistema de la partícula (absorción), para luego ser emitido como energía cambiando la longitud de onda (emisión). El proceso de dispersión corresponde a la reflexión de los fotones, y que dependiendo del tamaño de la partícula y la longitud de onda considerada, puede ser en una o varias direcciones. Dependiendo de la cantidad de partículas que interactúan se habla de dispersión singular en el caso de una, y de dispersión múltiple con varias. Ambos fenómenos atenúan el rayo de luz, este proceso se denomina *extinción*, por lo tanto la extinción corresponde al resultado conjunto de la absorción y la dispersión (Liou, 2002).

La dispersión, la absorción y la emisión influyen en las estimaciones realizadas en percepción remota. Tal como se vio en el capítulo 3, el AMF juega un rol importante pues depende de los procesos de transferencia radiativa que ocurren en la atmósfera. Sin embargo el AMF definido como la razón entre la columna inclinada y la columna vertical, resulta complicado asignar un valor cuantitativo a los fenómenos de transferencia radiativa. Es por ello que resulta necesaria una parametrización que incluya una cuantificación de la absorción, dispersión y emisión del SO<sub>2</sub> e incorporar valores medidos y/o modelados de estas cantidades en el cálculo del AMF (Palmer et al., 2001).

### 5.1. Parametrización del AMF

Para calcular el AMF en este trabajo se utiliza la formulación hecha en Palmer et al. (2001). La gran ventaja que presenta esta fórmula es que es posible realizar un cálculo que incluye las variables relevantes de una forma clara y de fácil interpretación.

Antes de comenzar con esta sección recordemos que la ley de Beer-Bouguer para la extinción es la base de las mediciones de carga de los compuestos químicos que absorben, a determinadas longitudes de onda, la luz que proviene del sol. Esta ley nos dice que (Liou, 2002):

$$I_B = I_{B_0} e^{-\tau_s} \quad (5.1)$$

donde  $I_B$  corresponde a la intensidad retro-dispersada observada por el instrumento satelital,  $I_{B_0}$  corresponde a la intensidad retro-dispersada que se observaría en la ausencia de un compuesto que absorba (notar que hemos omitido la notación sub  $\lambda$  para simplificar), y  $\tau_s$  es el espesor óptico para la columna inclinada.

Comenzamos con la definición del AMF, que corresponde a la razón entre la columna inclinada y la columna vertical, que también puede ser escrita en términos del espesor óptico:

$$AMF = \frac{\Omega_s}{\Omega_v} = \frac{\tau_s}{\tau_v} \quad (5.2)$$

donde  $\Omega_s$  y  $\Omega_v$  corresponden a la columna inclinada y vertical respectivamente.  $\tau_s$  y  $\tau_v$  corresponden al espesor óptico inclinado y vertical respectivamente. De esta definición es posible realizar el siguiente desarrollo (Palmer et al., 2001):

$$AMF = \frac{\tau_s}{\tau_v} = \frac{Ln(1 - \frac{\Delta I}{I_B})}{\tau_v} \quad (5.3)$$

$$\approx - \frac{1}{\tau_v} \frac{\Delta I}{I_B} \quad (5.4)$$

$$= - \frac{1}{\tau_v} \int_0^{\tau_v} \frac{\partial Ln(I_B)}{\partial \tau} d\tau \quad (5.5)$$

$$= - \frac{1}{\tau_v} \int_0^{\infty} \frac{\partial Ln(I_B)}{\partial \tau} \alpha(z) n(z) dz \quad (5.6)$$

$$= - \int_0^{\infty} \frac{\partial Ln(I_B)}{\partial \tau} \frac{\alpha(z)}{\alpha_e} \frac{n(z)}{\Omega_v} dz \quad (5.7)$$

La igualdad (5.3) proviene de la Ley de Beer-Bouguer, al despejar una de las intensidades. Notando que  $\Delta I = I_B - I_{B_0}$ , la aproximación (5.4) proviene de considerar que la absorción es pequeña comparada con la intensidad medida ( $\Delta I/I_B \ll 1$ ). La igualdad (5.5) proviene de escribir una diferencia en términos de una integral, tomando como variable de integración el espesor óptico. El paso (5.6) corresponde a utilizar la definición de espesor óptico, donde  $\alpha(z)$  corresponde a la sección de corte de absorción y  $n(z)$  corresponde a la concentración en unidades de moléculas por metro cúbico. En (5.7), se utiliza que  $\tau_v = \Omega_v \alpha_e$  donde

$$\alpha_e = \frac{1}{\Omega_v} \int_0^{\infty} \alpha(z) n(z) dz \quad (5.8)$$

corresponde a la sección de corte efectiva para la absorción y que representa un promedio utilizando como peso la cantidad del compuesto que existe en la vertical. De esta forma se definen:

$$\omega(z) = - \frac{1}{AMF_G} \frac{\alpha(z)}{\alpha_e} \frac{\partial \ln I_B}{\partial \tau} \quad (5.9)$$

$$S(z) = \frac{n(z)}{\Omega_v} \quad (5.10)$$

donde  $AMF_G$  corresponde al Factor de Masa Atmosférico Geométrico, que corresponde al valor del AMF cuando no hay dispersión. De esta forma el  $AMF_G = \sec(\theta_s) + \sec(\theta_v)$ , con  $\theta_s$  y  $\theta_v$  corresponden al ángulo cenital solar y al de visión del satélite respectivamente. La definición de este valor del factor de masa en función de los ángulos, se ilustra con el siguiente esquema:

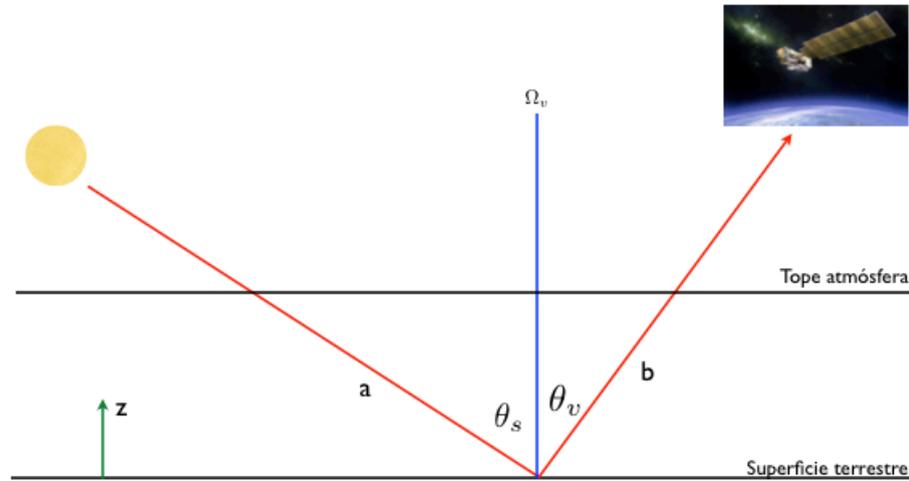


Figura 5.1: Esquema del factor de masa atmosférico en ausencia de dispersión ( $AMF_G$ )

Como bien sabemos de la misma definición de AMF, notando que la columna inclinada  $\Omega_s = a + b$ , se tiene:

$$\begin{aligned} AMF &= \frac{\Omega_s}{\Omega_v} = \frac{a + b}{\Omega_v} \\ &= \frac{a}{\Omega_v} + \frac{b}{\Omega_v} \\ &= \sec(\theta_s) + \sec(\theta_v) \end{aligned}$$

la última igualdad, proviene de la definición de la función secante. De esta expresión se desprende que el valor del  $AMF_G \leq 2$ , donde el valor máximo se alcanza cuando el sol y el satélite están en la misma línea de visión. Esto último, nos indica, que por el sólo hecho de tener un ángulo de visión, ya existe sesgo en la estimación del factor de masa

atmosférico.

Observando la expresión (5.9), vemos que  $\omega(z)$  representa la variación de la cantidad de radiación en el tope de la atmósfera debido a cambios en la cantidad de  $\text{SO}_2$ , usualmente denominada función de peso y  $S(z)$  representa un perfil normalizado del compuesto. Con estas definiciones se llega a la formulación final para el AMF, dada por:

$$AMF = AMF_G \int_0^{z_{top}} \omega(z) S(z) dz \quad (5.11)$$

Finalmente para tener esta formulación en coordenadas  $\sigma$ , que resulta apropiada ya que el modelo utiliza este tipo de representación para la altura, se utiliza la definición de  $\sigma = p/p_0$  donde  $p_0$  es la presión en la superficie y la ecuación hidrostática para tener que:

$$d\sigma = - \frac{\rho_a g}{p_0 - p_{top}} dz \quad (5.12)$$

donde  $\rho_a$  es la densidad de la atmósfera,  $g$  la aceleración gravitacional y  $p_{top}$  la presión al tope del modelo. Luego definiendo  $S_\sigma$  como:

$$S_\sigma = \frac{\Omega_a}{\Omega_v} C(\sigma) \quad (5.13)$$

donde  $\Omega_a$  es la columna vertical de aire desde  $p_0$  hasta  $p_{top}$  y  $C(\sigma)$  es la razón de mezcla de  $\text{SO}_2$ , se tiene que el AMF en coordenadas  $\sigma$  tiene la forma:

$$AMF = AMF_G \int_0^1 \omega(\sigma) S_\sigma(\sigma) d\sigma \quad (5.14)$$

Esta función es la que contiene la información sobre la dispersión que ocurre en el camino en el cual se toma la medición. En este camino, las variables que tienen incidencia son el perfil del compuesto de estudio ( $\text{SO}_2$ ), la cantidad de ozono, puesto que las mediciones de intensidad son en la zona UV, y la nubosidad entre otras. Un esquema más general de la toma de mediciones se muestra en la figura 5.2.

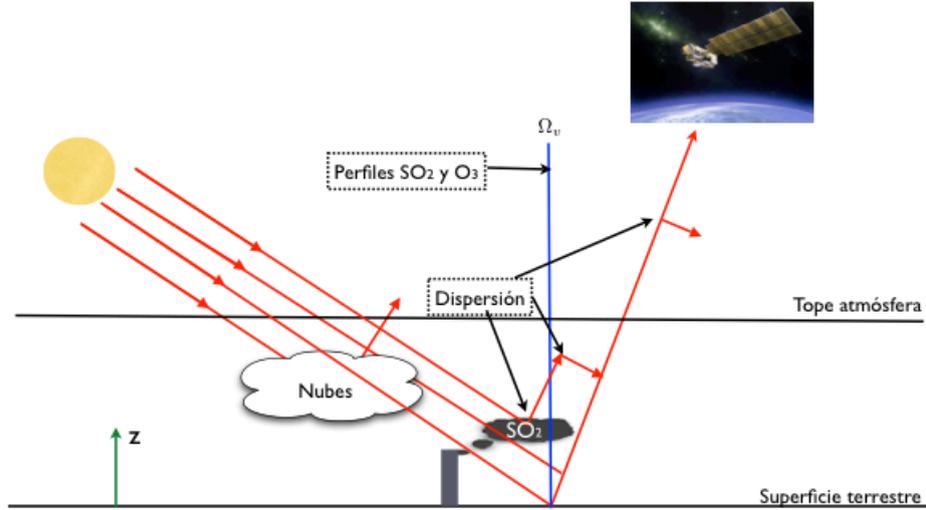


Figura 5.2: Esquema del factor de masa atmosférico general

Para ver el real impacto del valor del AMF sobre las columnas inclinadas, basta mirar el valor operacional que utilizan los datos OMI, que denominamos  $AMF_{op}$ . Este valor se calcula considerando primero que  $\theta_s = 30^\circ$ ,  $\theta_v = 0$ , albedo superficial igual a un 5%, sin nubosidad y sin considerar perfiles de aerosoles, un perfil de ozono para latitudes medias y un perfil de  $SO_2$  de verano medido en EE.UU. Con esas condiciones,  $AMF_{op} = 0,36$ , es decir  $\Omega_v = \Omega_s/0,36$ , lo que equivale a decir que cada columna inclinada es amplificada por un valor cercano a 3 en cada punto de medición, de manera tal que el valor del AMF no es despreciable.

Es importante destacar que la formulación 5.14 se ha quitado la dependencia explícita de las columnas inclinada y vertical, y que ahora es posible calcular el AMF necesitando el perfil normalizado del compuesto en coordenadas  $\sigma$ , además de la información sobre la dispersión en las distintas alturas, representadas en la función  $\omega$ . Esto permite realizar estimaciones del AMF con nuevas otras fuentes de información.

## 5.2. Modelo de Transferencia Radiativa

Se utiliza el modelo *Linearized Discrete Ordinate Radiative Transfer* (LIDORT) (Spurr et al., 2000) para calcular la sensibilidad de la intensidad de la atmósfera ( $I_B$ ) con respecto a la cantidad de  $SO_2$  presente en la atmósfera, definida en la sección 5.1 como  $\omega(\sigma)$ . LIDORT resuelve la Ecuación de Transferencia Radiativa (ETR) en una atmósfera de multicapas, incluyendo procesos de dispersión múltiple, en este caso es posible escribir la ETR como:

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu, \phi)}{d\tau} = I(\tau, \mu, \phi) - J(\tau, \mu, \phi) \quad (5.15)$$

donde  $I$  es el campo de intensidad monocromático para una determinada longitud de onda. La coordenada de espesor óptico ( $\tau$ ) se mide perpendicular al límite de la atmósfera, con  $\tau = 0$  en el tope. La dirección esta especificada por los parámetros  $\mu = |\cos(\alpha)|$ , con  $\alpha$  el ángulo cenital y el ángulo azimutal  $\phi$ . El término  $J$  corresponde a la función de fuente, que consiste en tres términos: la contribución de la dispersión múltiple, la emisión termal y la contribución de la dispersión simple. Para resolver la ETR se utiliza el método de Chandrasekhar (1960), que consiste en utilizar expansiones en serie de Fourier para el campo de intensidad y expansión en polinomios de Legendre para la función de fase, en la dispersión múltiple. La solución se encuentra debido a que esta parametrización conforma un sistema diferencial de ecuaciones, suponiendo un número finito de capas homogéneas (Spurr et al., 2000).

Si bien existen varios modelos que resuelven esta ecuación (e.g. DISORT, Stamnes et al., 1988; MODTRAN, Berk et al., 1998) se utiliza LIDORT pues ya se tiene experiencia en cálculos similares del AMF para otros compuestos (e.g Palmer et al. (2001)). LIDORT además contiene un modulo específico que realiza análisis de perturbación sobre la intensidad ( $I_B$ ). Este módulo permite calcular las funciones de dispersión como  $\omega(\sigma) \approx \partial \ln I_B / \partial \tau$ . Un punto importante es que el objetivo es calcular la variabilidad del AMF con respecto a los perfiles de  $\text{SO}_2$  a una resolución menor comparada con la que tiene GEOS-Chem, utilizada en Lee et al. (2009). Siguiendo esta idea introducimos los siguientes parámetros de entrada con el modelo: albedo y columna total de ozono se mantienen con el valor que se calcula actualmente el AMF operacional; no consideramos nubes ni aerosoles al igual que el cálculo del valor operacional utilizando el hecho de que nuestro cálculo es para el verano. El valor del ángulo cenit solar (SZA) y ángulo cenit de visión satelital (VZA) provienen de los datos de OMI; La presión superficial y el perfil de  $\text{SO}_2$  provienen de HIRLAM-MATCH. La tabla 5.1 muestra un resumen de las fuentes de información de los parámetros de entrada utilizados en esta tesis comparado con el trabajo de Lee et al. (2009).

Tabla 5.1: Comparación de fuentes de información de los parámetros de entrada de LIDORT

	Albedo	Total Ozono	Aerosol	Nubes	SZA & VZA	Presión Superficial	Perfil $\text{SO}_2$
Este trabajo	Constante (0.05)	Constante (325DU)	No	No	OMI	MATCH	MATCH
Lee et al., 2009	TOMS	OMI	GEOS-Chem	OMI	OMI	GEOS-Chem	GEOS-Chem

El albedo UV utilizado en el trabajo de Lee et al. (2009) es un valor climatológico obtenido de Herman and Celarier (1997). Es importante destacar que LIDORT ha sido utilizado en varios trabajos relacionados con estimación de AMF en otros satélites como el Global Ozone Monitoring Experiment (GOME) (Palmer et al., 2001) e incluso para otros compuestos como  $\text{NO}_2$  (Martin et al., 2002).

# Capítulo 6

## Resultados

El primer resultado que se muestra en las figuras 6.1a y 6.1b, que son los perfiles calculados con el modelo en Santiago y la fundición Caletones respectivamente. La línea negra muestra el promedio en la zona de estudio y las barras rojas muestran la desviación estándar en cada nivel. En este caso es posible apreciar la diferencia entre los dos perfiles tanto en la forma como en el orden de magnitud. La presencia de un máximo en altura para el perfil de Santiago, al mismo nivel del máximo en el perfil de Caletones, se asocia a eventos de bajas costeras tal como se describió en el trabajo de Gallardo et al. (2002).

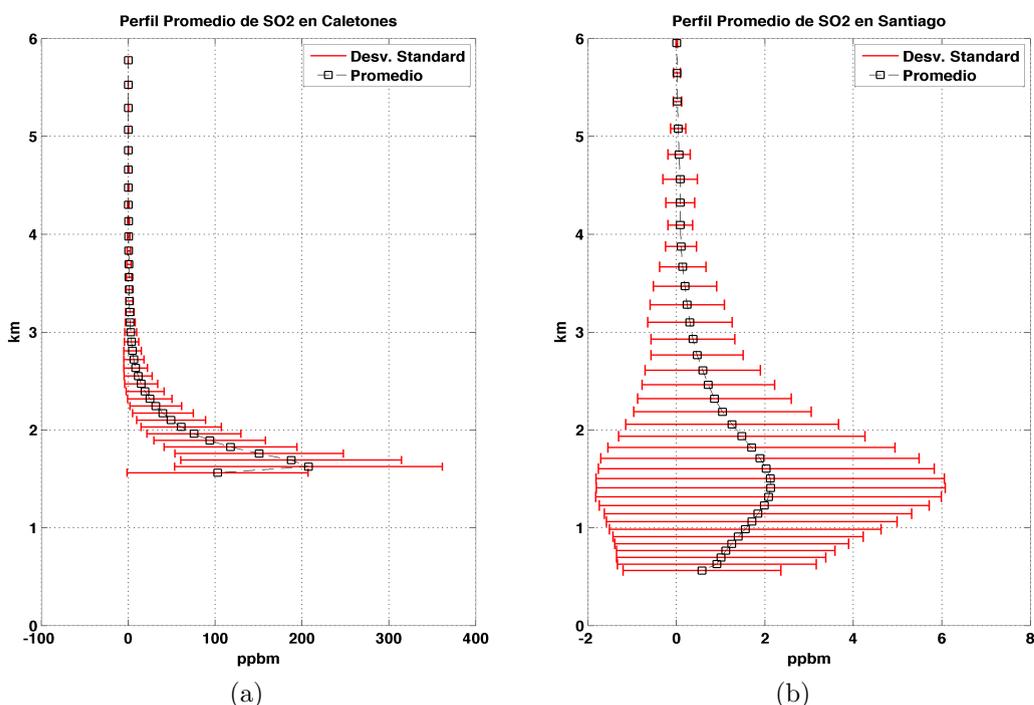


Figura 6.1: Perfil de SO<sub>2</sub> en Santiago y Caletones en unidades de ppbm. La línea negra demarca el promedio en (a) Caletones y (b) Santiago. Las barras rojas ilustran la desviación estándar en cada nivel. La altura se considera como km sobre el nivel del mar. Santiago está a 0.5km y Caletones a 1.5km sobre el nivel del mar.

Las figuras 6.2a y 6.2b muestran la comparación de los perfiles normalizados de dióxido

de azufre en Santiago y Caletones modelados con MATCH. Además las figuras muestran el perfil normalizado utilizado actualmente en el calculo del AMF (Krotkov et al., 2006) y también el perfil normalizado del modelo de escala global GEOS-Chem, correspondiente al pixel de la zona centro de Chile, utilizado en el trabajo de Lee et al. (2009). Para estimar los perfiles del modelo sólo consideramos el promedio en aquellos datos que se encuentran entre las 17 y 20 UTC (13 a 16 Horas de tiempo local) que corresponde al intervalo en el cual OMI sobrepasa volando en Chile Central ( $\sim 14$  tiempo local), tal y como se sugiere en el trabajo de Lee et al. (2009). En ambas figuras la línea negra sólida con diamantes corresponde al perfil operacional en las figuras 6.2a y 6.2b. Este perfil es utilizado para estimar el valor operacional constante en los datos OMI de capa límite ( $AMF=0.36$ ) (Krotkov et al., 2006). Las líneas punteadas con triángulos representan el promedio de los perfiles calculates con GEOS-Chem desde Enero a Marzo del 2006 en las figuras 6.2a y 6.2b. De esta forma es posible ver las diferencias que existen entre los datos que han sido modelados con MATCH para Chile central con respecto a los perfiles que ahn sido utilizados para calcular el AMF en trabajos anteriores.

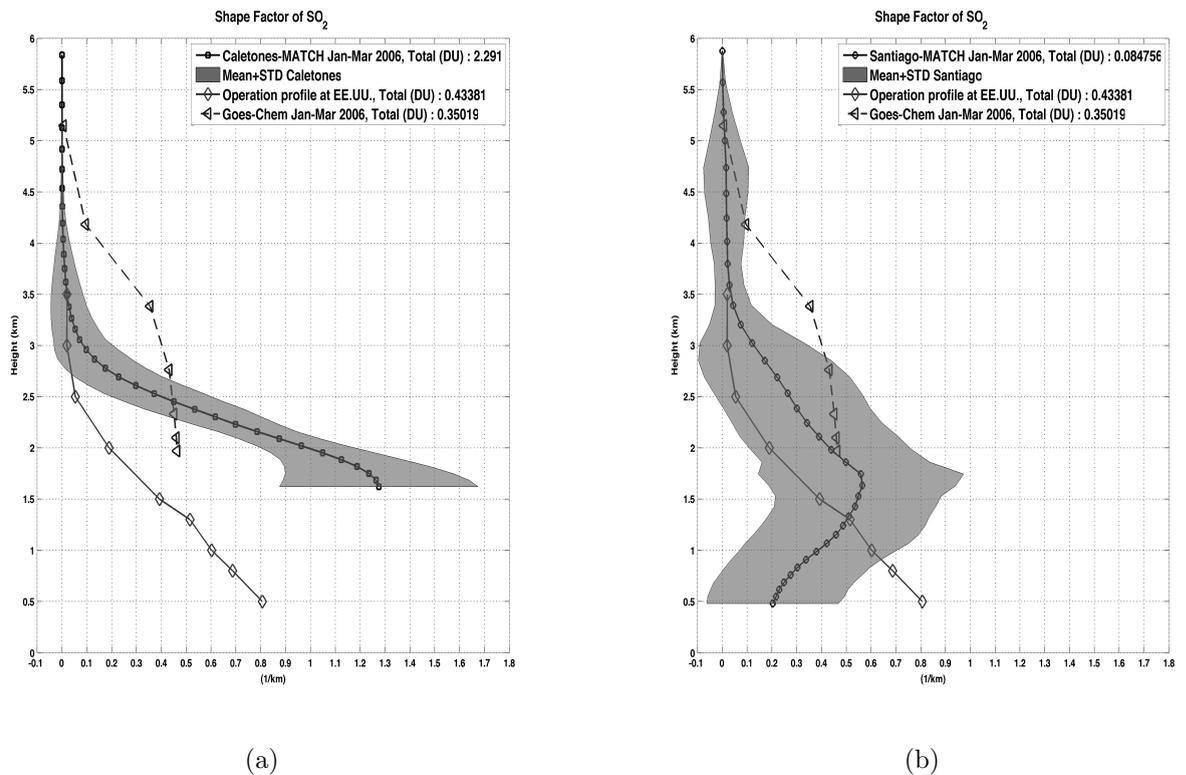


Figura 6.2: Perfil normalizado de  $SO_2$  en Santiago y Caletones. (a) La línea negra con círculos corresponde al perfil de Caletones donde además el color gris corresponde a la suma del promedio con su desviación estándar. (b) La línea negra con círculos corresponde al perfil de Santiago y la línea gris demarca la suma del promedio con la desviación estándar.

La figura 6.3a muestra el resultado del AMF estimado en la zona central de Chile. En este caso es posible apreciar que la zona de Caletones, Ventana y Santiago se demarcan con valores menores al resto de la región, correspondiente donde hay valores máximos de carga de azufre oxidado. La figura 6.3b muestra el promedio de la corrección realizada sobre los datos OMI, es decir muestra el valor  $0.36/\text{AMF}$ , tal como se sugiere en la expresión 2.2. Las figuras muestran la variabilidad del AMF con respecto al valor constante en la zona central de Chile y que los valores menores a 0.36 están ubicados en la zona de ventanas. También es posible ver que la corrección del AMF en la zona de Caletones, debiese conducir a una leve disminución y que en la zona oceánica los valores de  $\text{SO}_2$  debiesen reducirse considerablemente ya que el valor de la corrección es cercano a 0.

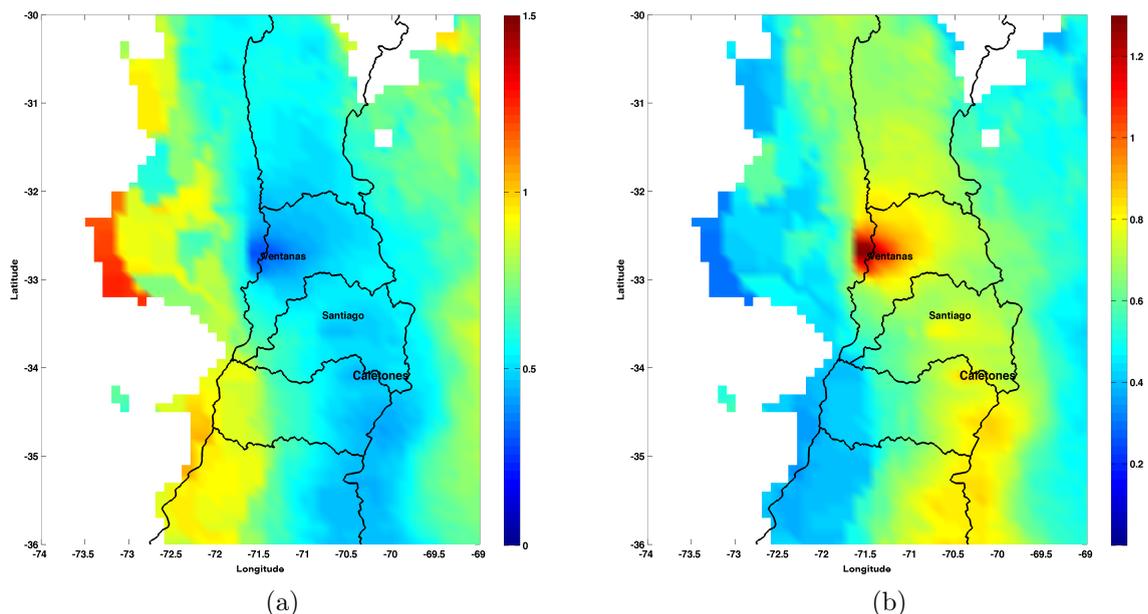


Figura 6.3: (a) Promedio de AMF estimado entre Enero y Marzo del 2006. (b) Promedio de  $0.36/\text{AMF}$  entre Enero y Marzo del 2006. El valor  $0.36/\text{AMF}$  corresponde a la corrección hecha sobre las observaciones OMI.

A continuación se muestra la evolución de las estimaciones de carga de  $\text{SO}_2$  con OMI, a través de las sucesivas correcciones con el valor del AMF y del filtro estadístico descritos en la metodología. Para ayudar a la comparación de los resultados, se nombra *Corrección 1*: al procedimiento en el que primero se corrige la estimación de carga de  $\text{SO}_2$  con el AMF y luego hace el filtrado estadístico de percentiles de la población y el filtro de Fourier; *Corrección 2*: al procedimiento en el que primero se corrige la estimación de carga de  $\text{SO}_2$  con el AMF y luego se hace el filtrado estadístico de percentiles de la población. *Corrección 3*: al procedimiento que primero se hace el filtrado estadístico de percentiles y de Fourier a la estimación de carga de  $\text{SO}_2$  y luego la corrección del AMF; y finalmente *Corrección 4*: que corresponde al procedimiento en el cual, primero se hace el filtrado estadístico sólo de percentiles a la estimación de carga de  $\text{SO}_2$  y luego la corrección del AMF.

La figura 6.4, muestra los resultados promedio para la *Corrección 1* donde el cuadro (a) muestra el promedio de los datos originales de OMI, el cuadro (b) muestra los datos de  $\text{SO}_2$  corregidos con el AMF estimado, el cuadro (c) muestra el promedio de los datos de dióxido de azufre filtrados luego de la corrección por AMF y el cuadro (d) muestra el promedio de la columna vertical de  $\text{SO}_2$  calculada con el modelo. El promedio con los datos del modelo, se calcula considerando las horas en las cuales el satélite pasa por Chile, es decir entre las 13 y 16 horas aproximadamente. De esta forma es posible observar que el AMF logra reducir valores altos del promedio en la zona oceánica, comparado con los datos originales. Estos valores si son eliminados cuando posteriormente se filtran los datos. También es posible ver que la señal de Caletones no se ve dramáticamente reducida por el cambio del AMF, tal como se esperaba de los resultados del valor del AMF. La señal si se ve reducida cuando se aplica el filtro, reduciendo la carga en la zona de Caletones en unas 4 décimas ( $\sim 20\%$ ). La figura 6.5 muestra la desviación estándar de los datos promedio, que muestra una reducción al aplicar la corrección del AMF, pero aún así persisten puntos con una alta variabilidad ( $\sim 4$  DU). Sin embargo, luego de aplicar el filtrado estadístico es posible ver que la variabilidad de la señal es uniforme en los puntos de medición y también es baja ( $< 1$  DU).

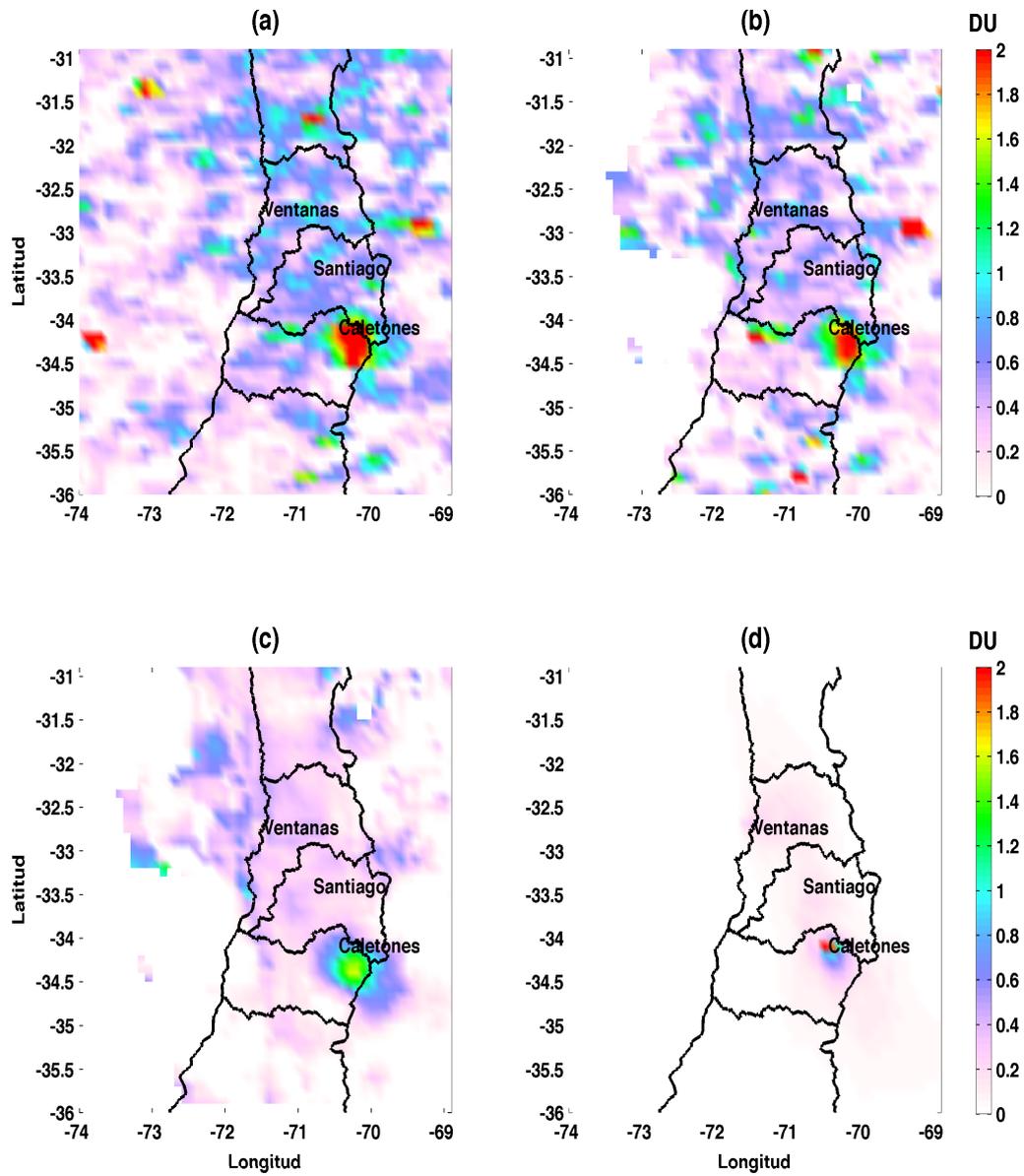


Figura 6.4: (a) Promedio de los datos OMI considerando sólo las recomendaciones del sitio de descarga. (b) Promedio de datos OMI de carga de SO<sub>2</sub>, corregido por el AMF. (c) Promedio de datos OMI de carga de SO<sub>2</sub>, filtrados después de la corrección. (d) Promedio de carga de SO<sub>2</sub> estimada con MATCH.

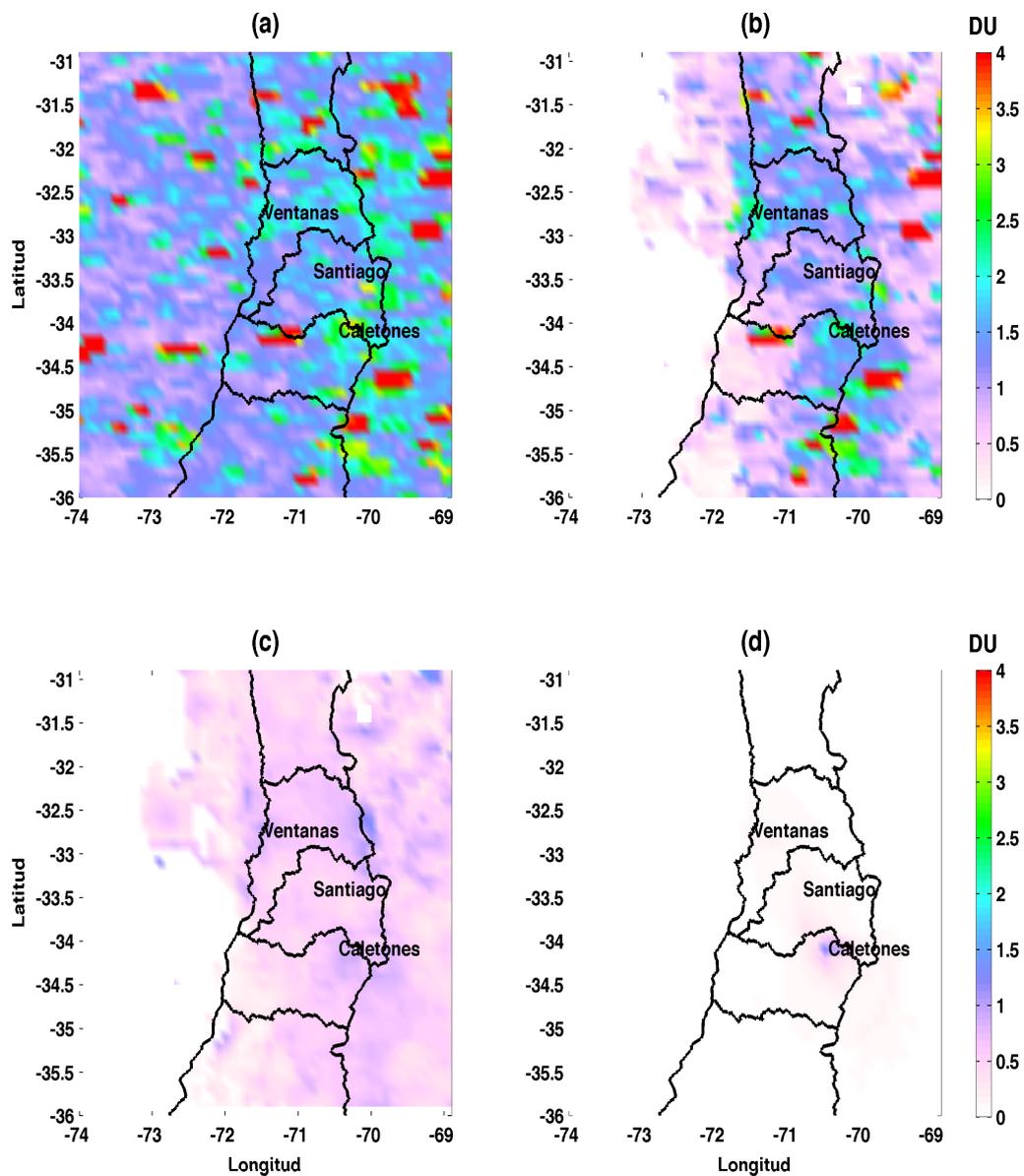


Figura 6.5: (a) Desviación estándar de los datos OMI considerando sólo las recomendaciones del sitio de descarga. (b) Desviación estándar de datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$ , corregido por el AMF. (c) Desviación estándar de datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$  filtrados, después de la corrección por AMF. (d) Desviación estándar de carga de  $\text{SO}_2$  estimada con MATCH.

La figura 6.6, muestra el promedio de los datos de carga de  $\text{SO}_2$ , obtenidos con el procedimiento *Corrección 2* donde el cuadro (a) muestra el promedio de los datos originales de OMI, el cuadro (b) muestra los datos de  $\text{SO}_2$  corregidos con el AMF estimado, el cuadro (c) muestra el promedio de los datos de dióxido de azufre filtrados sólo con el filtro de percentiles, luego de la corrección por AMF y el cuadro (d) muestra el promedio de la columna vertical calculada con el modelo. En este caso es posible ver que la señal del sector de Caletones no pierde su valor promedio en la zona cercana. Además, el panel (c) de la figura 6.6, muestra que varios de los puntos con valores altos, en lugares anómalos, disminuyen su valor. La figura 6.7 muestra la desviación estándar de los datos promedio

calculados. En este caso también es posible apreciar una suavización en el panel (c) en la zona central de Chile, pero con valores más altos ( $> 1$  DU).

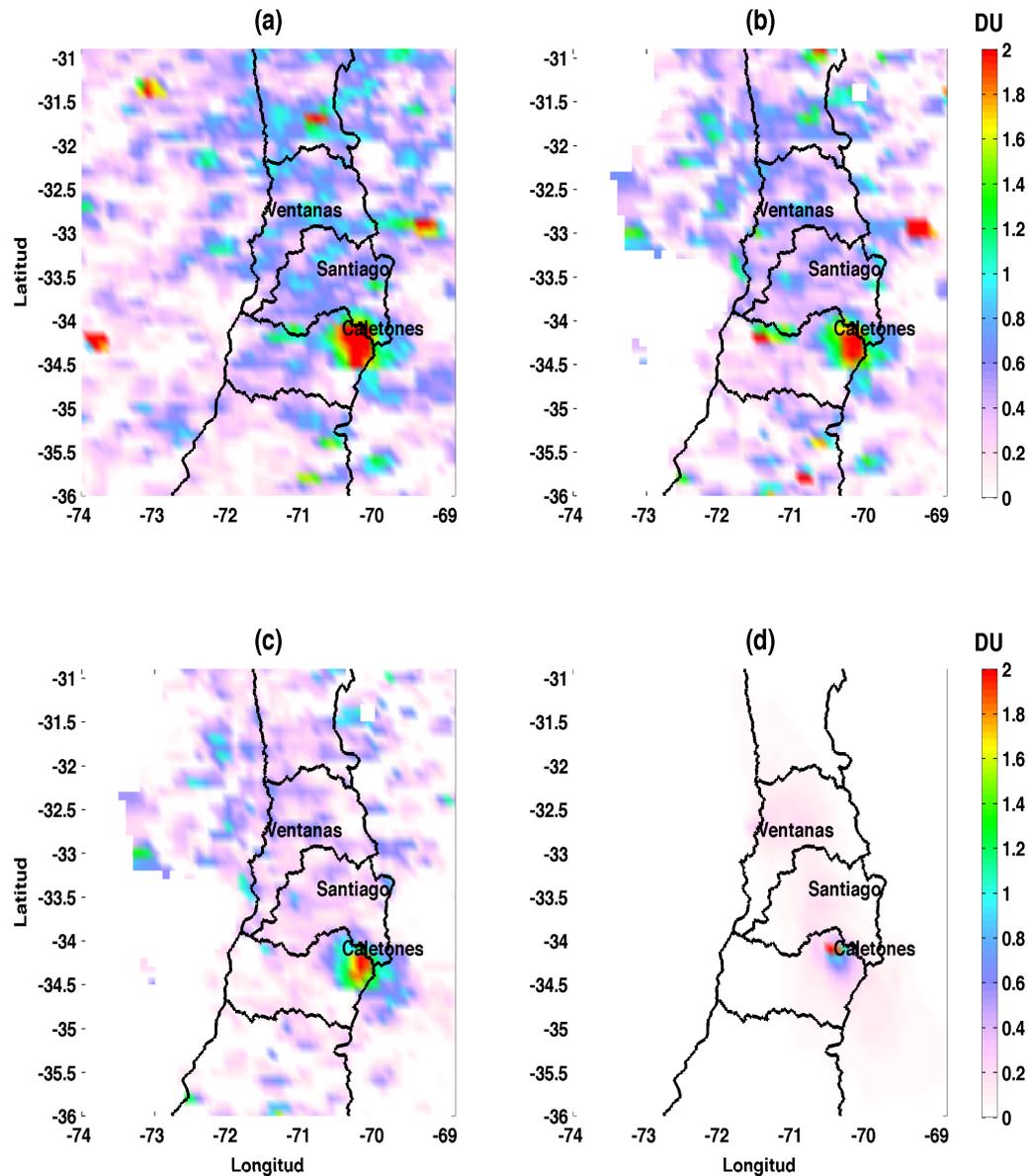


Figura 6.6: (a) Promedio de los datos OMI considerando sólo las recomendaciones del sitio de descarga. (b) Promedio datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$ , luego de corrección del AMF. (c) Promedio de los datos de carga de  $\text{SO}_2$  filtrados, utilizando sólo los percentiles 1% y 99%, luego de la corrección del AMF. (d) Promedio de carga estimada de  $\text{SO}_2$  con MATCH.

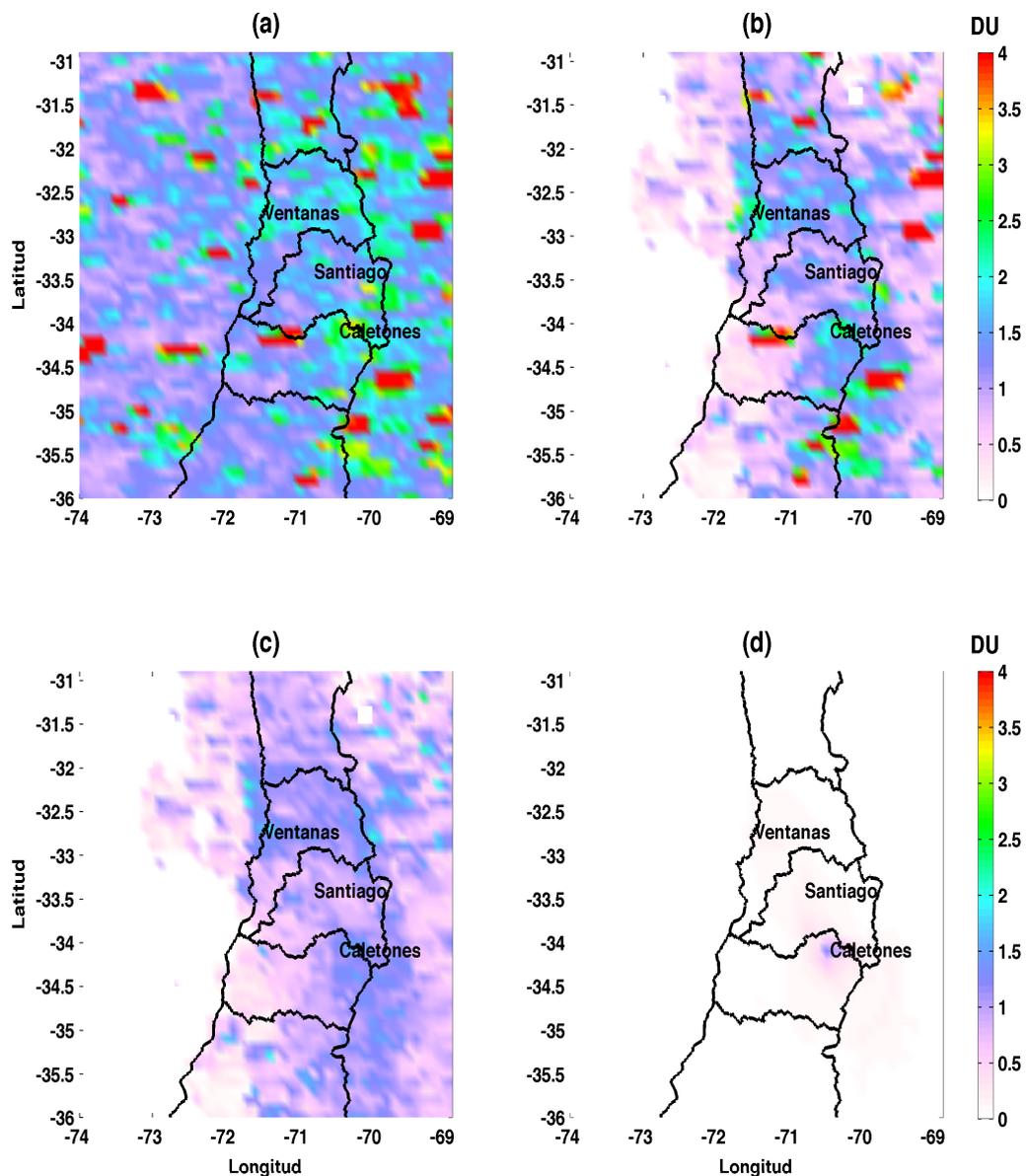


Figura 6.7: (a) Desviación estándar de los datos OMI entre Enero y Marzo del 2006 considerando sólo las recomendaciones del sitio de descarga. (b) Desviación estándar de carga de  $\text{SO}_2$  OMI luego de corrección del AMF. (c) Desviación estándar de los datos de carga de  $\text{SO}_2$  filtrados, utilizando sólo los percentiles 1% y 99%, luego de la corrección del AMF. (d) Desviación estándar de carga de  $\text{SO}_2$  estimada con MATCH.

La figura 6.8, muestra el promedio de los datos de carga de  $\text{SO}_2$ , obtenidos del procedimiento *Corrección 3* donde el cuadro (a) muestra el promedio de los datos originales de OMI, el cuadro (b) muestra el promedio de los datos de dióxido de azufre filtrados, el cuadro (c) muestra los datos de  $\text{SO}_2$  corregidos con el AMF estimado, luego del filtrado estadístico y el cuadro (d) muestra el promedio de la columna vertical calculada con el modelo. En este caso el filtrado elimina inmediatamente los valores de aquellos puntos altos en lugares donde se sabe que no existen fuentes importantes. Luego al aplicar la corrección del AMF, es posible visualizar que hay una reducción también de 4 décimas,

tal como se obtuvo al hacer el procedimiento *Corrección 1*. La figura 6.9 muestra la desviación estándar de los datos promedio, donde es posible ver que es un resultado uniforme en la región, con valores entre 0.5 y 1.5 DU. Sin embargo al aplicar la corrección por el AMF, se ve una reducción con valores menores que 1 DU en la región.

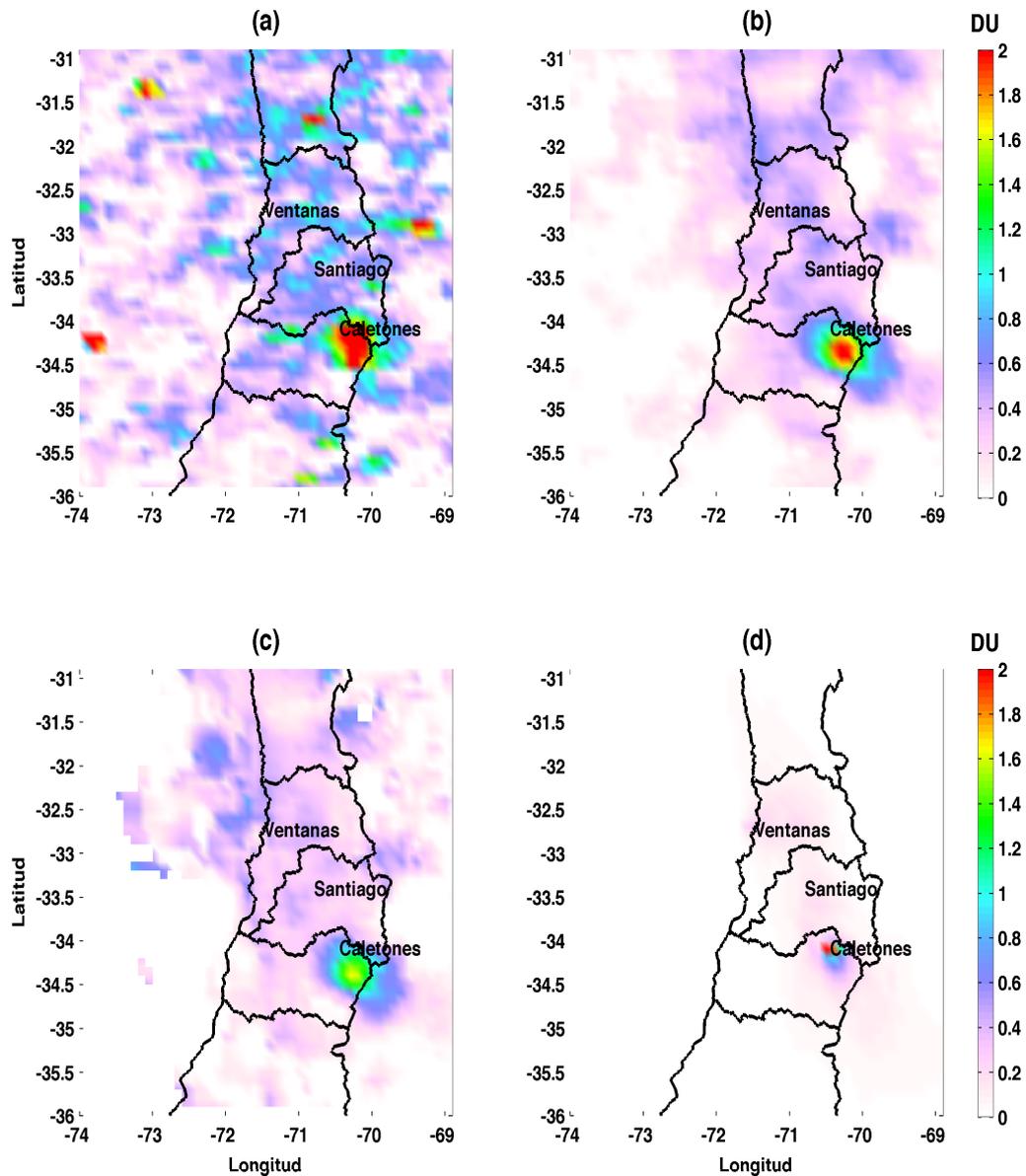


Figura 6.8: (a) Promedio de los datos OMI considerando sólo las recomendaciones del sitio de descarga. (b) Promedio de datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$ , filtrados estadísticamente. (c) Promedio de datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$ , corregidos después del filtro estadístico. (d) Promedio de carga de  $\text{SO}_2$  estimada con MATCH.

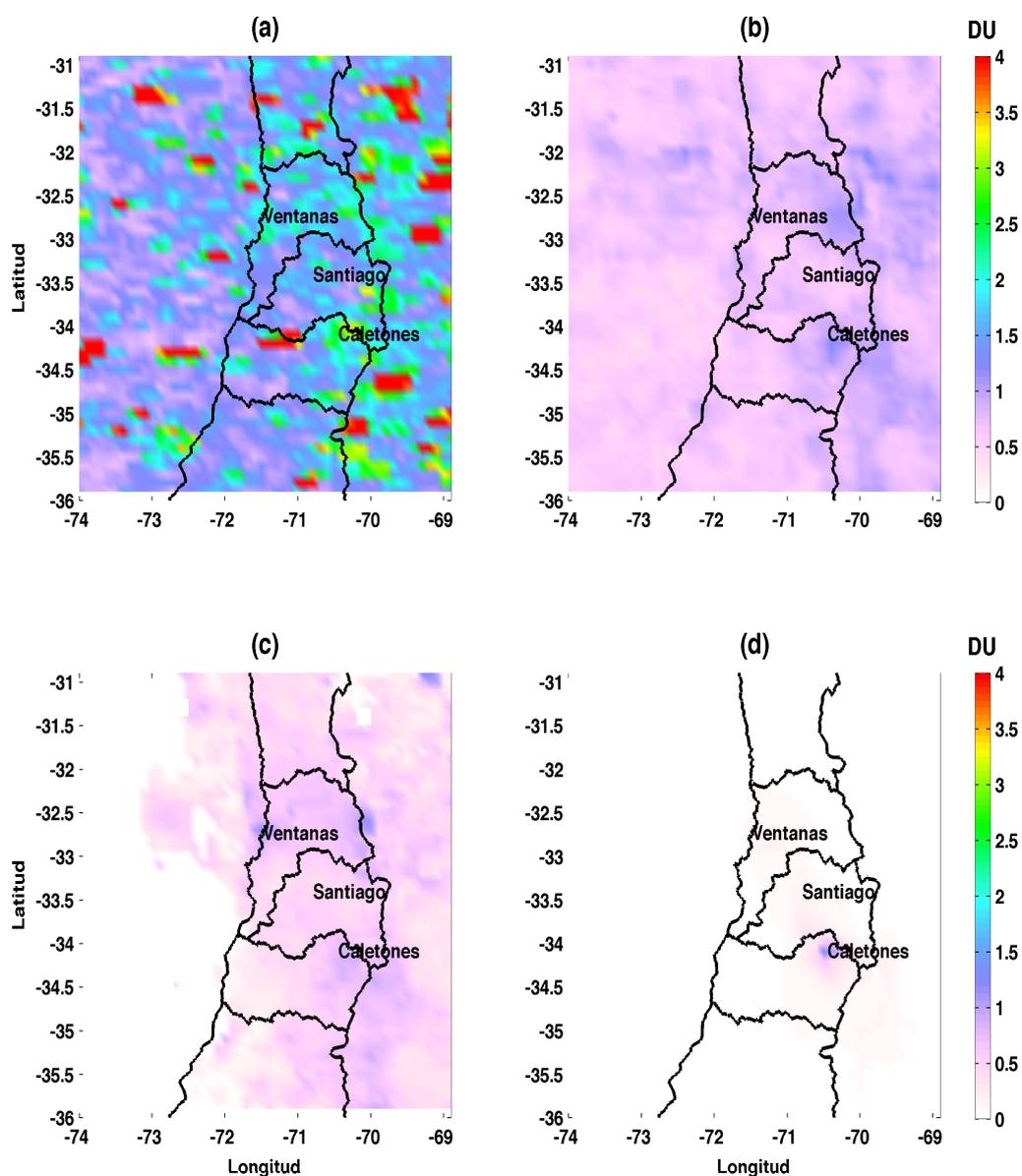


Figura 6.9: (a) Desviación estándar de los datos OMI considerando sólo las recomendaciones del sitio de descarga. (b) Desviación estándar de datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$ , filtrados estadísticamente. (c) Desviación estándar de datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$ , corregidos después del filtro estadístico. (d) Desviación estándar de carga de  $\text{SO}_2$  estimada con MATCH.

Finalmente, la figura 6.10, muestra el promedio de los datos de carga de  $\text{SO}_2$ , obtenidos del procedimiento *Corrección 4* donde el cuadro (a) muestra el promedio de los datos originales de OMI, el cuadro (b) muestra el promedio de los datos de dióxido de azufre filtrados, el cuadro (c) muestra los datos de  $\text{SO}_2$  corregidos con el AMF estimado, luego del filtrado estadístico y el cuadro (d) muestra el promedio de la columna vertical calculada con el modelo. En este caso a pesar de que no se considera el filtro de Fourier, también desaparecen los puntos anómalos de la región. Posteriormente la aplicación de la corrección del AMF, no reduce el valor en la señal de Caletones. La figura 6.11 muestra los resultados de la desviación estándar de los promedios, donde se aprecia la uniformidad

a lo largo de la región, similar a la que se obtuvo en los resultados de variabilidad de la *Corrección 3*, pero con valores más altos.

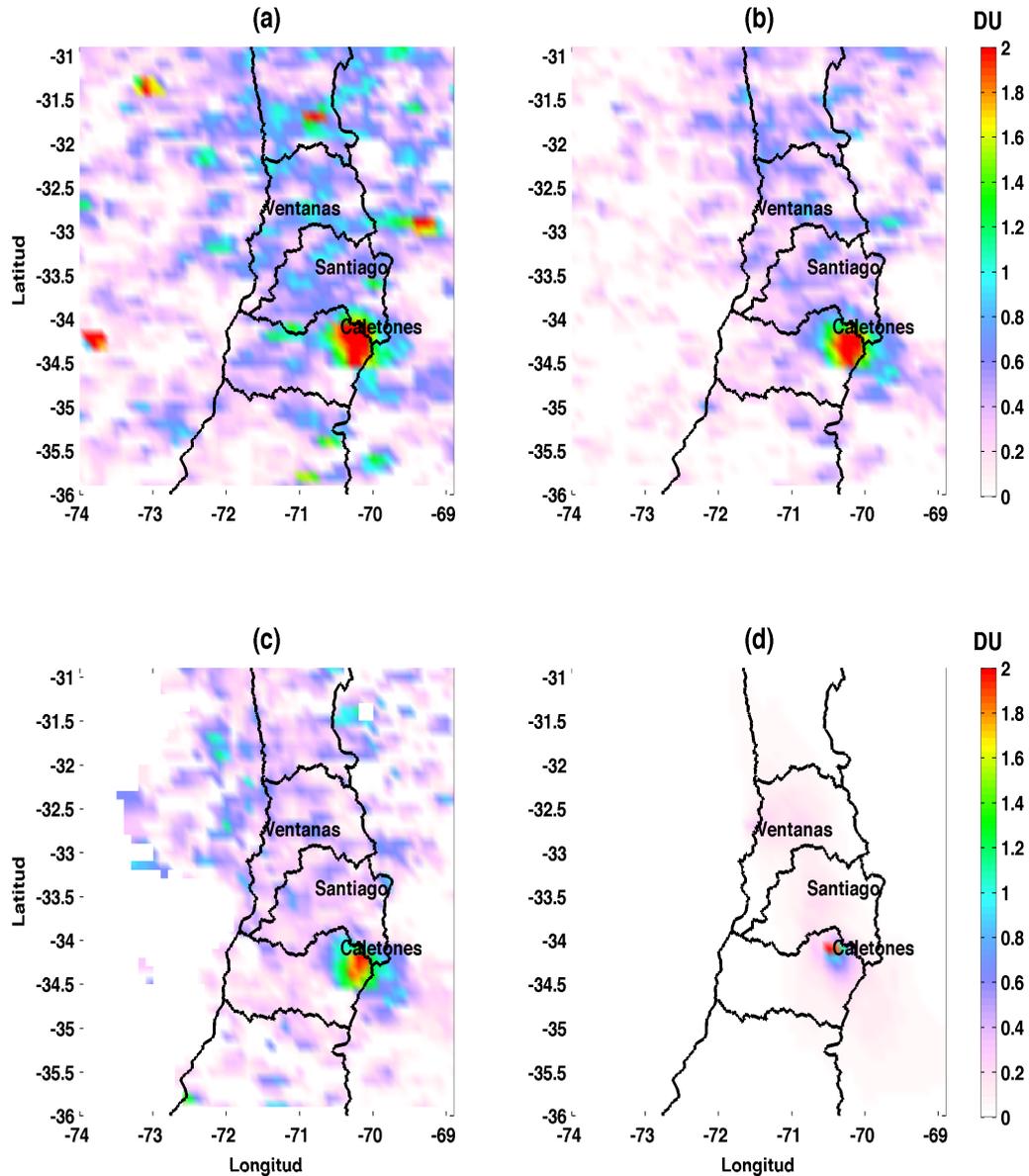


Figura 6.10: (a) Promedio de los datos OMI considerando sólo las recomendaciones del sitio de descarga. (b) Promedio de datos OMI de carga de SO<sub>2</sub>, filtrados estadísticamente. (c) Promedio de datos OMI de carga de SO<sub>2</sub>, corregidos después del filtro estadístico. (d) Promedio de carga de SO<sub>2</sub> estimada con MATCH.

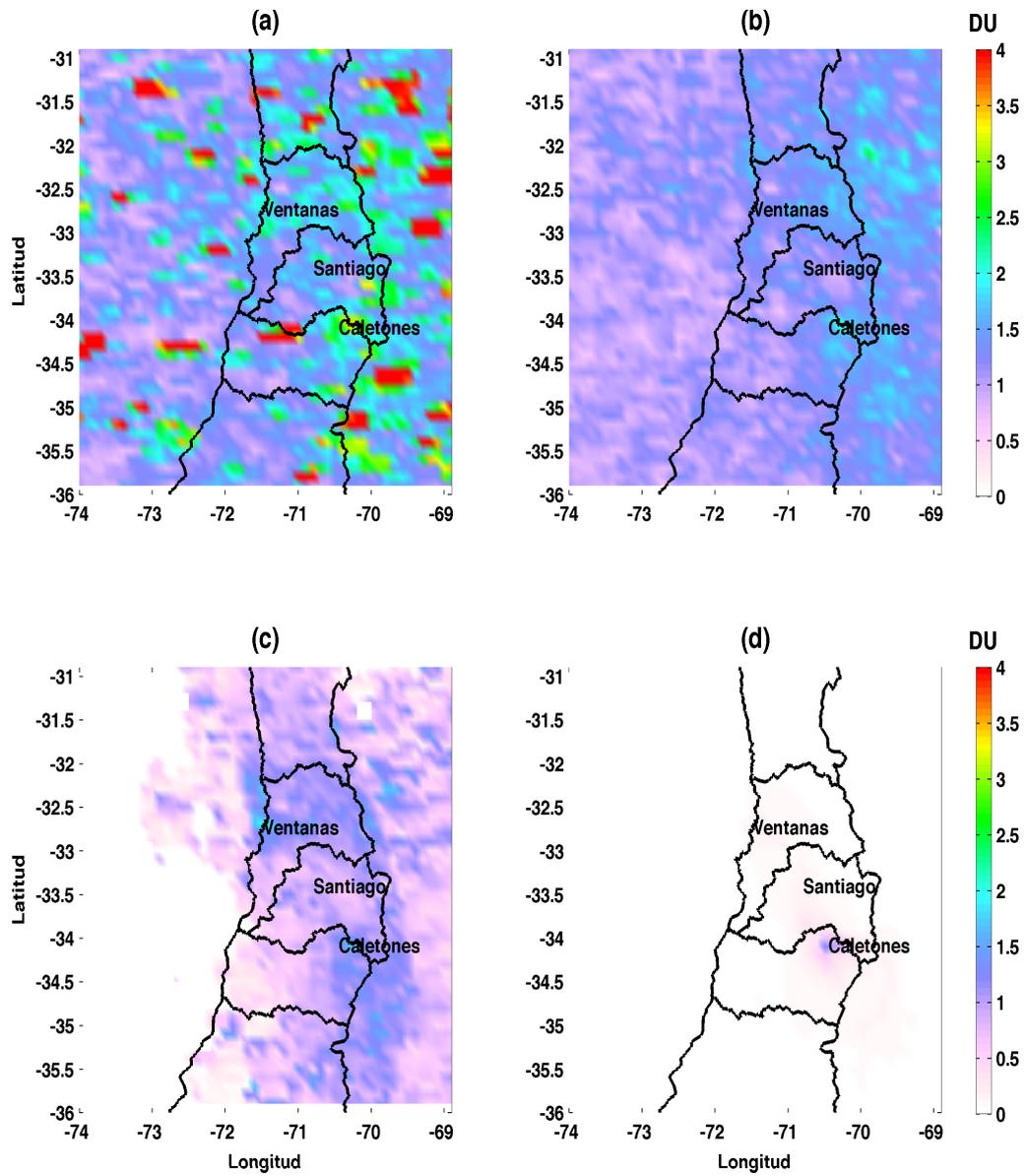


Figura 6.11: (a) Desviación estándar de los datos OMI considerando sólo las recomendaciones del sitio de descarga. (b) Desviación estándar de datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$ , filtrados estadísticamente. (c) Desviación estándar de datos OMI de carga de  $\text{SO}_2$ , corregidos después del filtro estadístico. (d) Desviación estándar de carga de  $\text{SO}_2$  estimada con MATCH.

La tabla 6.1, muestra el promedio de la desviación estándar en la zona de estudio, para los cuatro procedimientos. Donde se ve que el mayor impacto en la variabilidad de las series se produce cuando se incluye el filtro de Fourier. La columna *Original* corresponde al promedio en Chile central de la desviación estándar de los datos OMI. La columna Paso 1 denota la aplicación del primer procedimiento y Paso 2, el segundo procedimiento que se aplica, dependiendo la corrección. Para dar un ejemplo, si consideramos la fila del procedimiento *Corrección 1*, la columna Paso 1 corresponde al promedio de la desviación estándar cuando se corrigen los datos originales con el AMF y Paso 2 corresponde al promedio de la desviación estándar de los datos OMI cuando se realiza el filtrado.

Tabla 6.1: Comparación de promedios de la desviación estándar de la estimación de la columna de  $\text{SO}_2$  para distintos procedimientos.

Procedimiento	Desviación estándar		
	Original	Paso 1	Paso 2
<i>Corrección 1</i>	1.72	1.00	0.45
<i>Corrección 2</i>	1.72	1.00	0.73
<i>Corrección 3</i>	1.72	0.69	0.36
<i>Corrección 4</i>	1.72	1.19	0.60

# Capítulo 7

## Conclusiones

El presente trabajo explora la sensibilidad de la estimación satelital de carga de dióxido de azufre, con respecto a la distribución vertical de  $\text{SO}_2$  a través de la simulación de los procesos de dispersión de azufre oxidado y de la transferencia radiativa. También revisa las capacidades del Instrumento de Monitoreo de Ozono (OMI) como herramienta para estimar la carga de dióxido de azufre en la zona Central de Chile. El trabajo estudia también como varía localmente la estimación de carga satelital de  $\text{SO}_2$  con respecto a cambios en la distribución vertical del compuesto a lo largo de la zona de estudio. Finalmente el trabajo presenta una metodología para abordar la estimación del Factor de Masa Atmosférico (AMF) utilizando datos de un modelo de escala regional, con baja resolución horizontal, que simula la dispersión del azufre oxidado.

Los perfiles estimados con el modelo *Atmospheric Transport and Chemistry Model* (MATCH), muestran que a lo largo de la región de estudio existen diferencias, tanto en la cantidad presente como en la forma. Es el caso de los perfiles simulados en Santiago y Caletones. Los perfiles de  $\text{SO}_2$  normalizados en Santiago y Caletones, muestran las diferencias que hay con respecto al perfil normalizado que se utiliza actualmente para estimar la columna vertical de  $\text{SO}_2$  en OMI y también con respecto al perfil normalizado, correspondiente a Chile Central, que calcula el modelo global GEOS-Chem utilizado en el trabajo de Lee et al. (2009). Sin embargo hay que destacar que las diferencias entre los perfiles modelados entre MATCH y GEOS-Chem, radican principalmente en la resolución, puesto que MATCH lo realiza con  $0,1^\circ \times 0,1^\circ$  y GEOS-Chem con  $2^\circ \times 2,5^\circ$ . De esta forma, el modelo regional permite representar fenómenos de mesoescala, como la circulación en torno a la montaña, que controlan la distribución del compuesto en la zona central de Chile.

El AMF es el parámetro clave para estimar la sensibilidad de la estimación de carga de  $\text{SO}_2$  con respecto a la distribución vertical de  $\text{SO}_2$ , dado que actualmente la estimación se hace considerando un perfil constante de dióxido de azufre. Las diferencias que existen en los perfiles a lo largo de la región hacen que el valor del AMF varíe también en la zona centro de Chile con respecto al valor del AMF operacional. La figura 6.3a permite observar que el valor del AMF sigue los parámetros tanto de la distribución de las emisiones como de los efectos de transporte del contaminante. La expresión  $0.36/\text{AMF}$  de la fórmula para la corrección de la señal de  $\text{SO}_2$  (ver 2.2) y que se encuentra graficado en la figura 6.3b,

nos indica que aquellos lugares con valores mayores a 1, aumenta la estimación de carga de  $\text{SO}_2$  por OMI, que corresponde a la zona denotada con colores rojizos, ubicada principalmente en la zona de la fundición Ventanas y zonas cordilleranas rodeando la fundición Caletones. Aquellos valores menores que uno de la expresión  $0.36/\text{AMF}$ , denotan la zona donde la señal se ve reducida. Esta zona está relacionado principalmente con el océano Pacífico y lugares allende la cordillera en Argentina, donde de acuerdo a nuestro modelo, no hay emisiones y tampoco existe un mecanismo de transporte (ver figura 4.11). Si bien la zona de Ventanas debiera verse intensificada, esto no se logra visualizar en el promedio regional en el panel (c) de la figura 6.4, ya que si bien el AMF cambia considerablemente (más del 100 %), los valores medidos por OMI en Ventanas son muy bajos y que concuerda con la estimación de carga modelada (panel (d) 6.4). La zona de Caletones, debiese mantenerse parecido a lo que ya se había estimado, lo que es posible apreciarlo en el panel (c) de la figura 6.4 donde sólo hay una baja de 0.2-0.6 décimas promedio, dependiendo del tipo de filtraje estadístico que se realiza.

La estimación de carga de  $\text{SO}_2$  de OMI, se corrige de dos formas que se aplican sucesivamente. Primero, utilizando el AMF estimado y segundo utilizando filtros estadísticos. Los resultados muestran que la estimación de carga es sensible a la aplicación de las correcciones, lo que se ve reflejado en los cambios del promedio y la reducción de la desviación estándar entre un 40 % hasta un 80 %, dependiendo de la corrección que se haga (ver tabla 6.1). La corrección sobre los datos originales utilizando el AMF implica una reducción de un 40 % de la desviación estándar con respecto a los datos originales, reflejando la sensibilidad de los datos al cambiar el perfil de  $\text{SO}_2$  utilizado. Sin embargo la distribución de la desviación estándar, en la zona central de Chile, tiene zonas con alta variabilidad ( $\sim 4$  DU), de manera que el promedio en esos puntos no es confiable. Es por ello que es resulta importante el filtrado estadístico, que contribuye a una reducción mayor de la desviación estándar. Al mirar los valores promedio de la desviación estándar en la tabla 6.1, los valores más bajos se obtienen cuando se aplica el filtro de Fourier, donde es importante recordar que las frecuencias que se cortan, corresponden a la variabilidad de 30 días que tienen las series. Sin embargo, la señal de Caletones es la que más se perjudica, pues el promedio se llega a reducir en 4 a 6 décimas, lo que representa un 20 % y 40 %. En cambio cuando sólo se considera el filtro que elimina aquellos valores bajo el percentil 1, y sobre el percentil 99, sólo se reduce el área en el cual alcanza el valor máximo ( $\sim 2$  DU). Por esta razón, si bien se logra reducir y suavizar el valor de la desviación estándar a través de los filtros, se pierde sensibilidad del instrumento. En este caso sería interesante saber que es lo que ocurre cuando el estudio es de una duración mayor, por ejemplo un año, incluyendo de esta forma una variación estacional en el AMF y ver cual sería el impacto en una escala mayor de tiempo del filtros estadísticos.

## 7.1. Trabajo Futuro

El presente trabajo tiene ciertas falencias, que a su vez dejan posibilidades de futura profundización, donde uno de estos puntos es la fiabilidad de la representación de los perfiles, puesto que no existe observación alguna en la cual comprobar estos resultados y frente a esto quedan dos posibilidades al menos. La primera consistiría en utilizar varios modelos de escala local con las mismas emisiones y utilizar un AMF promedio entre las

distintas estimaciones hechas por cada modelo o en su defecto utilizar un perfil promedio de las distintos modelo en cada uno de los puntos de la región.

Otra alternativa sería realizar una campaña de medición de perfiles de  $\text{SO}_2$  en la zona centro de Chile. Para ello existen dos alternativas una costosa, que sería tener aviones (Piper PA-23) con instrumentación apropiada como el detector de fluorescencia pulsada (TEI Model 43C, Luke, 1997). Existen trabajos que han explorado esta alternativa como es el caso de la campaña realizada en EE.UU. (Taubman et al., 2006) de donde se obtuvo el perfil operacional utilizado actualmente en OMI. Otro ejemplo, y más reciente, es la campaña que se realizó en China que buscaba ver los impactos de la polución debido al rápido crecimiento de los últimos años del país asiático (Dickerson et al., 2007). Existe también una alternativa para un presupuesto más reducido, utilizando ozonosondas modificados para medir  $\text{SO}_2$  (Morris et al., 2010). En este caso se utiliza el hecho que la presencia de  $\text{SO}_2$  interfiere las celdas electroquímicas de la ozonsonda, de manera que se reporta una molécula de  $\text{O}_3$  menos por cada molécula de  $\text{SO}_2$  presente en la atmósfera, siempre y cuando la cantidad de ozono sea mayor que la de azufre oxidado.

El segundo punto importante es realizar una validación más exhaustiva para HIRLAM en la zona de estudio. Si bien se hicieron algunas comparaciones para ver que el modelo funcionaba de manera razonable, es importante tener mayor certeza de cuales son los puntos en los cuales falla y por que falla el modelo meteorológico, sobre todo considerando las diferencias que existen en la representación de los vientos en superficie, que tienen mayor incidencia puesto que las emisiones se encuentran en estos niveles.

El tercer punto que se debe estudiar corresponde a incluir variables que no fueron consideradas en este trabajo y que influyen en la estimación del AMF (National Aeronautics and Space Administration Website). Algunas de las variables a considerar pueden ser:

- Nubosidad, utilizando la formulación del trabajo de Lee et al. (2009).
- Albedo UV, utilizando los datos de reflectividad de OMI promediados desde el inicio de sus actividades hasta el día de hoy.
- Cantidad total de ozono, utilizando los sondeos realizados en Santiago por el Centro Nacional del Medio Ambiente (CENMA, <http://aire.cenma.cl/>).
- Aerosoles, utilizando una modelación que incluya una modelación más compleja incluyendo fotoquímica.

En este caso lo que se busca es que la estimación sea más precisa, pues cada una de estas variables tiene impactos en la variación del AMF. Además un punto importante y necesario para ver la variación estacional del AMF tiene que ver con una corrida del modelo, con una duración de un año, de esta forma la inclusión de nubes principalmente tendrá un efecto en la estimación final, tal como se plantea el trabajo de Lee et al. (2009).

# Bibliografía

- A. Berk, L. S. Bernstein, G. P. Anderson, P. K. Acharya, D. C. Robertson, J. H. Chetwynd, and S. M. Adler-Golden. MODTRAN Cloud and Multiple Scattering Upgrades with Application to AVIRIS. *Remote Sensing of Environment*, 65(3):367–375, 1998.
- I. Bey, D. J. Jacob, R. M. Yantosca, J. A. Logan, B. D. Field, A. M. Fiore, Q. Li, H. Y. Liu, L. J. Mickley, and M. G. Schultz. Global modeling of tropospheric chemistry with assimilated meteorology: Model description and evaluation. *Journal of Geophysical Research*, 106(23):23,703 – 23,095, 2001.
- K. Bogumil, J. Orphal, T. Homann, S. Voigt, P. Spietz, O. C. Fleischmann, A. Vogel, M. Hartmann, H. Kromminga, H. Bovensmann, J. Frerick, and J. P. Burrows. Measurements of molecular absorption spectra with the sciamachy pre-flight model: instrument characterization and reference data for atmospheric remote-sensing in the 230–2380 nm region. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 157:167 – 184, 2003.
- J. P. Burrows, M. Weber, M. Buchwitz, V. Rozanov, A. Ladsätter-Weinßenmayer, A. Richter, R. DeBeek, R. Hoogen, K. Bramstedt, K. Eichmann, M. Eisinger, and D. Perner. The Global Ozone Monitoring Experiment (GOME): Mission concept and first scientific results. *American Meteorological Society*, pages 151–175, 1998.
- S. A. Carn. Web-based publications nasa earth observatory newsroom (2008) aerosols from chaiten volcano. [http://earthobservatory.nasa.gov/Newsroom/NewImages/images.php3?img\\$\\_\\$id=18040](http://earthobservatory.nasa.gov/Newsroom/NewImages/images.php3?img$_$id=18040), 2008.
- S. A. Carn, A. J. Krueger, G. J. S. Bluth, S. J. Schaefer, N. A. Krotkov, I. M. Watson, and S. Datta. Volcanic eruption detection by the total ozone mapping spectrometer (toms) instruments: a 22-year record of sulfur dioxide and ash emissions. *Oppenheimer C, Pyle DM, Barclay J (eds) Volcanic degassing. Geological Society, London, Special Publications*, pages 177 – 222, 2003.
- S. A. Carn, A. J. Krueger, N. A. Krotkov, K. Yang, and P. F. Levelt. Sulfur dioxide emissions from peruvian copper smelters detected by the Ozone Monitoring Instrument. *Geophysical Research Letters*, 34(L09801), 2007. doi: 10.1029/2006GL029020.
- C. Castillo. Percepción remota y uso de modelación inversa para la estimación de emisiones de megafuentes de azufre oxidado en la zona central de Chile. Master’s thesis, Universidad de Chile, 2011.
- S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*. Number 0-486-60590-6. Dover Publications inc., 1960.

- L. Clarisse, P. F. Coheur, A. J. Prata, D. Hurtmans, A. Razavi, T. Phulpin, J. Hadji-Lazaro, and C. Clerbaux. Tracking and quantifying volcanic SO<sub>2</sub> with IASI, the september 2007 eruption at Jebel at Tair. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 8:7723–7734, 2008.
- C. Clerbaux, A. Boynard, L. Clarisse, M. George, J. Hadji-Lazaro, H. Herbin D. Hurtmans, M. Pommier A. Razavi, S. Turquety, C. Wespes, and P. F Coheur. Monitoring of atmospheric composition using the thermal infrared IASI/MetOp sounder. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10:6041–6054, 2009.
- Organización Mundial de la Salud. Calidad del aire y salud. <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs313/es/>, Visto en Agosto 2012.
- R. R. Dickerson, C. Li, Z. Li, L. T. Marufu, J. W. Stehr, B. McClure, N. Krotkov, H. Chen, P. Wang, X. Xia, X. Ban, F. Gong, J. Yuan, and J. Yang. Aircraft observations of dust and pollutants over northeast China: Insight into the meteorological mechanisms of transport. *Journal of Geophysical Research*, 112(D24S90), 2007.
- DICTUC. Actualización del inventario de emisiones de contaminantes atmosféricos en la Región Metropolitana. [www.sinia.cl/1292/articles-49590\\_inf\\_final\\_inventario.pdf](http://www.sinia.cl/1292/articles-49590_inf_final_inventario.pdf), Visto en Agosto 2012.
- S. Eckhardt, A. J. Prata, P. Seibert, K. Stebel, and A. Stohl. Estimation of the vertical profile of sulfur dioxide injection into the atmosphere by a volcanic eruption using satellite column measurements and inverse transport modelling. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 8:3881–3897, 2008.
- M. Eisinger and J. P. Burrows. Tropospheric Sulfur Dioxide observed by the ERS-2 GOME Instrument. *Atmospheric Environment*, 25(22):4177–4180, 1998.
- J. Fishman, K. Bowman, J. P. Burrows, A. Richter, K. V. Chance, D. P. Edwards, R. V. Martin, G. A. Morris, R. B. Pierce, J. R. Ziemke, J. A. Al-Saadi, J. K. Creilson, T. K. Schaack, and A. M. Thompson. Remote sensing of tropospheric pollution from space. *American Meteorological Society*, pages 805–821, 2008.
- L. Gallardo. *Trazas atmosféricas y su modelación. Capítulo 4, en Contaminación atmosférica urbana: episodios críticos de contaminación ambiental en la ciudad de Santiago*. Editorial Universitaria, 2006.
- L. Gallardo, G. Olivares, A. Aguayo, J. Langner, B. Aarhus, M. Engardt, and L. Gidhagen. Strengthening of the air quality information system: Application of a regional-scale model over the central part of chile. Technical report, Comisión Nacional del Medio Ambiente, 2000.
- L. Gallardo, G. Olivares, J. Langner, and B. Aarhus. Coastal lows and sulfur air pollution in Central Chile. *American Meteorological Society*, pages 805–821, 2002.
- J. R. Herman and E. A. Celarier. Earth surface reflectivity climatology at 340 - 380 nm from toms data. *Journal of Geophysical Research*, 102(D23):28,003–28,011, 1997.

- N. Huneeus, L. Gallardo, and J. A. Rutllant. Offshore transport episodes of anthropogenic sulfur in Northern Chile: Potential impact on the stratocumulus cloud deck. *Geophysical Research Letters*, 33(L19819), 2006. doi: 10.1029/2006GL026921.
- D. Jacob. *Introduction to Atmospheric Chemistry*. Princeton University Press, 1999.
- M. F. Khokar, C. Frankenberg, M. Van Roozendal, S. Beirle, S. Köhl, A. Richter, U. Platt, and T. Wagner. Satellite observations of atmospheric SO<sub>2</sub> from volcanic eruptions during the time-period of 1996-2002. *Advanced in Space Research, Elsevier*, 36:879–887, 2005. doi: 10.1029/2006GL026921.
- N. A. Krotkov, S. A. Carn, A. J. Krueger, P. K. Bhartia, and K. Yang. Band residual difference algorithm for retrieval of SO<sub>2</sub> from the Aura Ozone Monitoring Instrument (OMI). *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 44(5):1259–1266, 2006.
- N. A. Krotkov, B. McClure, R. R. Dickerson, S. A. Carn, C. Li, P. K. Bartia, K. Yang, A. J. Krueger, Z. Li, P. F. Levelt, H. Chen, P. Wang, and D. Lu. Validation of SO<sub>2</sub> retrievals from the Ozone Monitoring Instrument over NE China. *Journal of Geophysical Research*, 113(D16S40), 2008. doi: 10.1029/2007JD008818.
- N. A. Krotkov, M. R. Schoeberl, G. A. Morris, S. A. Carn, and K. Yang. Dispersion and lifetime of the so<sub>2</sub> cloud from the august 2008 kasatochi eruption. *Journal of Geophysical Research*, 115, 2010.
- A. Krueger, N. Krotkov, and S. Carn. El Chichon: The genesis of volcanic sulfur dioxide monitoring from space. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 44(5), 2008.
- A. J. Krueger, L. S. Walter, P. K. Bhartia, C. C. Schnetzler, N. A. Krotkov, I. Sprod, and G. J. S. Bluth. Volcanic sulfur dioxide measurements from the total ozone mapping spectrometer instruments. *Journal of Geophysical Research*, 100(D7):14,057–14,076, 1995.
- C. K. Lee, R. V. Martin, A. van Donkelaar, G. O’Byrne, N. A. Krotkov, A. Richter, L. G. Huey, and J. S. Holloway. Retrieval of vertical columns of sulfur dioxide from SCIAMACHY and OMI: Air mass factor algorithm development, validation, and error analysis. *Journal of Geophysical Research*, 114(D22303), 2009.
- P. F. Levelt, G. H. J. van den Oord, M. R. Dobber, A. Mälkki, H. Visser, J. de Vries, P. Stammes, J. O. V. Lundell, and H. Saari. The Ozone Monitoring Instrument. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 44(5):1093–1101, 2006.
- K. N. Liou. *An introduction to atmospheric radiation*. International Geophysics Series. Academic Press, second edition, 2002.
- J. Löndahl, E. Swietlicki, E. Lindgren, and S. Loft. Aerosol exposure versus aerosol cooling of climate: what is the total health outcome? *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10: 15055–15073, 2010.
- W. T. Luke. Evaluation of a commercial pulsed fluorescence detector for the measurement of low-level SO<sub>2</sub> concentrations during the Gas-Phase Sulfur Intercomparison Experiment. *Journal of Geophysical Research*, 102(D13):16,255 – 16,265, 1997.

- R. V. Martin. Satellite remote sensing of surface air quality. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 42:7823–7843, 2008.
- R. V. Martin, K. Chance, D. J. Jacob, T. P. Kurosu, R. J. D. Spurr, E. Bucsela, J. F. Gleason, P. I. Palmer, I. Bey, A. M. Fiore, Q. Li, R. M. Yantosca, and R. B. A. Koelemeijer. An improved retrieval of tropospheric nitrogen dioxide from GOME. *Journal of Geophysical Research*, 107(D20), 2002.
- G.A. Morris, W.D. Komhyr, J. Hirokawa, J. Flynn, and B. Lefer. A balloon sounding technique for measuring so<sub>2</sub> plumes. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 27:1318–1330, 2010.
- National Aeronautics and Goddard Space Flight Center Space Administration Website. Global Sulfur Dioxide Monitoring. <http://so2.gsfc.nasa.gov/>.
- G. Olivares, L. Gallardo, J. Langner, and B. Aarhus. Regional dispersion of oxidized sulfur in central chile. *Atmospheric Environment*, 36:3819–3828, 2002.
- P. I. Palmer, D. J. Jacob, K. V. Chance, R. V. Martin, R. J. D. Spurr, T. P. Kurosu, I. Bey, R. Yantosca, A. Fiore, and Q. Li. Air mass factor formulation for spectroscopic measurements from satellites: Application to formaldehyde retrievals from the global ozone monitoring experiment (gome). *Journal of Geophysical Research*, 2001.
- A. Richter, F. Wittrock, and J. P. Burrows. SO<sub>2</sub> measurements with SCIAMACHY. Technical report, Institute of Environmental Physics, University of Bremen, 2006.
- Lennart Robertson, Joakim Langner, and Magnuz Engardt. An Eulerian Limited-Area Atmospheric Transport Model. *Journal of Applied Meteorology*, 38:190–210, 1999.
- R. J. D Spurr, T. P. Kurosu, and K. V. Chance. A linearized discrete ordinate radiative transfer model for atmospheric remote-sensing retrieval. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 68:689–735, 2000.
- K. Stamnes, S-Chee Tsay, W. Wiscombe, and K. Jayaweera. Numerically stable algorithm for discrete-ordinate-method radiative transfer in multiple scattering and emitting layered media. *Applied Optics*, 27(12):2502–2509, 1988.
- L. Tarrason and T. Iversen. Modelling intercontinental transport of atmospheric sulphur in the northern hemisphere. *Tellus*, 50B:331–352, 1998.
- B. F. Taubman, J. C. Hains, A. M. Thomson, L. T. Marufu, B. G. Doddridge, J. W. Stehr, C. A. Piety, and R. R. Dickerson. Aircraft vertical profiles of trace gas and aerosol pollution over the mid-Atlantic United States: Statistics and meteorological cluster analysis. *Journal of Geophysical Research*, 111(D10S07), 2006.
- P. Undén, L. Rontu, and H. Järvinen et al. Hirlam-5 scientific documentation. Technical report, SMHI, 2002.
- V. Vestreng, G. Myhre, H. Fagerli, S. Reis, and L. Tarrasón. Twenty-five years of continuous sulphur dioxide emission reduction in europe. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7:3663–381, 2007.

- 
- K. Yang, N. A. Krotkov, A. J. Krueger, S. A. Carn, P. K. Bhartia, and P. F. Levelt. Retrieval of large volcanic SO<sub>2</sub> columns from the Aura Ozone Monitoring Instrument: Comparison and limitations. *Journal of Geophysical Research*, 112(D24S43), 2007.

# Apéndice A

## Código AMF

Para el desarrollo de este trabajo se adapto el código que calcula el AMF, y que fuera utilizado desde el trabajo de Palmer et al. (2001) hasta el de Lee et al. (2009), para que utilizará perfiles de SO<sub>2</sub> de MATCH. El código para calcular este factor corresponde a un subconjunto de módulos del modelo LIDORT, y que corresponde a aquellas funciones que realizan el análisis de sensibilidad principalmente. El código original esta escrito en FORTRAN 77 y contaba además con un modulo especialmente creado para la lectura de campos del modelo GEOS-Chem. En este trabajo se implementó un módulo FORTRAN que lee archivos txt de MATCH de cada variable en cada nivel. Estos archivos son generados por una de las utilidades con las que cuenta MATCH, denominada `gribtotxt`, que para cada hora y cada nivel vertical, escribe en un archivo con tres columnas la latitud, longitud y valor de la variable en dicho punto.

Un punto importante dentro del cálculo es tener los datos de OMI, en formato ASCII, que resulta costoso en términos computacionales y de espacio. Dentro de este programa escrito en IDL se calculan también los puntos de esquina de los pixeles de OMI, que son un dato importante a la hora de calcular que perfil de MATCH utilizar para dicha medición, en este trabajo se opto por saber cuales eran los perfiles dentro del pixel y promediarlos. En este caso la colaboración del grupo de estudio de Ciencias Atmosféricas de la Universidad de Dalhousie en Canadá, fue vital puesto que fueron utilizados sus recursos computacionales para dicho cálculo.

Las funciones programadas en el modulo denominado `MATCH_MOD` incluyen funciones para leer los archivos dependiendo de si la variable es en 3 dimensiones o si es sólo en superficie, además incluye una función para ver si el punto de grilla se encuentra dentro del pixel de OMI, utilizando el dato de la latitud y longitud de las esquinas de los pixeles.

A continuación se presenta el código del AMF en plenitud, este es un típico código de tipo FORTRAN que se inicia con la declaración de las variables que se utilizan dentro del programa en si. Las siguientes partes en orden son:

1. Ingreso de parámetros del usuario como fecha y archivo OMI
2. Lectura de matriz MATCH para el día como promedio entre las 17 y 20 UTC.
3. Inicialización de atmósfera típica en LIDORT.

4. Lectura de archivos `ascii` de OMI.
5. Iteración sobre cada una de las mediciones en el archivo OMI.
6. Calculo del perfil de  $\text{SO}_2$  promedio dentro del pixel.
7. Inicialización de variables de entrada a LIDORT.
8. Calculo de función de peso con LIDORT.
9. Calculo del perfil normalizado y calculo del AMF.
10. Escritura de archivo de salida con el AMF y perfil normalizado.

El script para el calculo se presenta a continuación y tiene por nombre `mainMATCH.F`:

```

1      PROGRAM CONVERT2VERTICAL
2
3      C-----
4      C This code will read the slant column and cloud observations ,
5      C find the corresponding 3-d
6      C chemistry trace gas profile and surface pressure , read in the
7      C surface albedo information and use this information to compute
8      C the air mass factor (AMF) used to convert the Satellite
9      C slant columns to vertical columns.
10     C
11     C Code originally written by Paul Palmer for HCHO, Spring 2000.
12     C Subsequently modified by Randall Martin
13
14
15     C-----
16
17     ! References to F90 modules
18     USE BPCH2_MOD
19     USE MATCHMOD
20     IMPLICIT NONE
21
22     # include "CMN_SIZE"
23     C LIDORT input variables
24     # include "include_s/LIDORT.PARS"
25     # include "include_e/LIDORT.L.PARS"
26     # include "include_s/LIDORT.CONTROL.VARS"
27     # include "include_s/LIDORT.MODEL.VARS"
28     # include "include_s/LIDORT.GEOPHYS.VARS"
29     # include "include_e/LIDORT.L.CONTROL.VARS"
30
31     INTEGER TG_TYPE           ! 0 = HCHO, 1 = NO2, 2 = SO2
32     INTEGER SAT_TYPE         ! 0 = GOME, 1 = SCIA or OMI, 3=OMI SO2
33     INTEGER I, J, L, J00, N
34     INTEGER LUN
35     INTEGER OLUN             ! Unit number for output file
36     INTEGER LINE
37     INTEGER NVALMAX
38     INTEGER MAXLINE
39     INTEGER LEV
40     INTEGER DAYNO
41     INTEGER SLEN
42     INTEGER MO, YR , HO
43     INTEGER DATE
44     INTEGER STATUS.INPUTREAD
45
46     PARAMETER ( LUN      = 20 )
47     PARAMETER ( OLUN     = 30 )
48     PARAMETER ( NVALMAX = 200000 )
49
50     C-----
51     C Regular-spaced grid
52     C-----
53     REAL*8 IMIN !West edge of model
54     REAL*8 IMAX !East edge of model
55     REAL*8 JMIN !South edge of full model grid

```

```

56     REAL*8  JMAX !North edge of full model grid
57 #if      defined( MATCH )
58     PARAMETER ( IMIN = -74.0 )
59     PARAMETER ( IMAX = -68.0 )
60     PARAMETER ( JMIN = -38.0 )
61     PARAMETER ( JMAX = -30.0 )
62 #endif
63 C-----
64 C MATCH txt file
65 C-----
66     CHARACTER(LEN=500) :: FILENAME
67     CHARACTER(LEN=500) :: FOLDERMATCH
68     CHARACTER(LEN=500) :: MATCHFILE
69     CHARACTER(LEN=500) :: OUTFILE
70     CHARACTER(LEN=500) :: AUXSTRING
71     CHARACTER(LEN=80)  :: VAR
72
73     INTEGER              :: IX,JY,ZL
74
75     INTEGER :: IND(NAER) !Tracer numbers for each aerosol type
76     DATA IND /4, 6, 9, 12, 15/
77
78 C Array is for each read_match
79     REAL*8  :: ARRAY(IIPAR,JJPARG,LLEFF)
80     REAL*8  :: ARRAY2(IIPAR,JJPARG)
81     REAL*8  :: LONGSQ(IIPAR,JJPARG), LATISQ(IIPAR,JJPARG)
82
83     REAL*8  :: TG(IIPAR,JJPARG,LLPARG) !Trace gas mixing ratio
84
85     REAL*8  :: TGAUX(LLPARG)
86     REAL*8  :: PSAUX
87     REAL*8  :: TMPAUX(LLPARG)
88
89     REAL*8  :: ARSL(IIPAR,JJPARG,LLPARG,NAER) ! Aerosol optical depth
90     REAL*8  :: ALBD !Surface reflectivity
91     REAL*8  :: PS(IIPAR,JJPARG) !Surface pressure
92     REAL*8  :: TMP(IIPAR,JJPARG,LLPARG) !Temperature
93     REAL*8  :: FRCLND(IIPAR,JJPARG) !Fraction of grid occupied by land
94     REAL*8  :: GEOS_VC(NVALMAX) !Vertical Column in the GEOS-CHEM model
95
96     LOGICAL :: INSIDE
97
98     INTEGER :: INSIDEM(IIPAR,JJPARG)
99     INTEGER :: DUM
100
101 C-----
102 C Observations OMI SO2
103 C-----
104
105 C Satellite instrument
106     CHARACTER(LEN=500) :: DATAFILE !Name of the ASCII
107     file of OMI
108     CHARACTER(LEN=12), DIMENSION(NVALMAX) :: DATESTR ! Date string
109     CHARACTER(LEN=6), DIMENSION(NVALMAX)  :: ORBNUM !Orbit number
110
111     INTEGER :: CTP(NVALMAX) ! Cross track position

```

```

111 REAL*8      :: LATC(NVALMAX) ! Latitude of center pixel
112 REAL*8      :: LONC(NVALMAX) ! Longitude of center pixel
113 REAL*8      :: SZA(NVALMAX) ! Solar Zenith Angle
114 REAL*8      :: VZA(NVALMAX) ! Viewing Zenith Angle
115 REAL*8      :: I1(NVALMAX), J1(NVALMAX) ! pixel edges
116 REAL*8      :: I2(NVALMAX), J2(NVALMAX)
117 REAL*8      :: I3(NVALMAX), J3(NVALMAX)
118 REAL*8      :: I4(NVALMAX), J4(NVALMAX)
119 REAL*8      :: SO2PBL(NVALMAX) ! So2 pbl product (in DU)
120 REAL*8      :: SO2TRL(NVALMAX)
121 REAL*8      :: SO2TRM(NVALMAX)
122 REAL*8      :: SO2STL(NVALMAX)
123 REAL*8      :: O3TOT(NVALMAX)
124 REAL*8      :: CHISQ(NVALMAX) ! Fitting uncertainty
125 REAL*8      :: CLF(NVALMAX) ! Cloud fraction (FRACTION)
126 REAL*8      :: ECLF(NVALMAX) ! Effective cloud fraction (FRACTION)
127 REAL*8      :: TPRESS(NVALMAX) ! Terrain pressure
128 REAL*8      :: THEIGHT(NVALMAX) ! Terrain height
129 REAL*8      :: UVIDX(NVALMAX) ! UV aer index
130 REAL*8      :: SO2IDX(NVALMAX,3) !
131 REAL*8      :: REF331(NVALMAX) ! Reflective at 331nm
132 REAL*8      :: RESWL(NVALMAX,12) ! Residual at 12 wavelengths
133 REAL*8      :: RESADWL(NVALMAX,12) ! Residual adjust at 12 wavelengths
134
135 C===== Starts the old database =====
136 INTEGER PIXEL(NVALMAX) ! Pixel number
137 INTEGER SCAN(NVALMAX) ! Scan position
138 REAL*4 SC ! Slant column (mol/cm2)
139 REAL*4 DSC ! Fitting uncertainty (mol/cm2)
140 REAL*4 FITRMS ! Fitting rms
141 C REAL*4 SZA ! Solar Zenith Angle
142 REAL*4 LOSZA ! Satellite viewing angle
143 REAL*4 RELAZM ! Relative azimuth angle
144 REAL*4 FCLD ! Cloud fraction (%)
145 REAL*4 PCLD ! Cloud top pressure (hPa)
146 REAL*4 OLATS ! Latitude of pixel center
147 REAL*4 OLONS ! Longitude of pixel center
148 REAL*4 TCOT ! Cloud optical thickness
149 REAL*4 STOZN ! Total ozone column (DU)
150 REAL*4 STOZNAMF ! AMF for STOZN
151 REAL*4 SALB ! Observed albedo
152 REAL*4 RCLF ! Radiative cloud fraction (%)
153 REAL*4 QF ! OMI measurement quality flag
154 REAL*4 TH ! Terrain height (km)
155 REAL*4 XT ! OMI XTrack no. (km)
156
157
158 REAL*8 LOGP
159 REAL*8 RSZA, RVZA, RCOT, RPCLD, RFCLD
160 REAL*8 RSTOZN
161 CHARACTER(LEN=11), DIMENSION(NVALMAX) :: TIME
162 LOGICAL NOOBS
163 LOGICAL LAMBERTIAN_CLOUDS
164
165 INTEGER SDATE ! Date
166

```

```

167 C
168 C AMF database
169 C
170
171 INTEGER IUSE, JUSE
172 REAL*8 SPIN(NVALMAX)      ! Surface pressure
173 REAL*8 SAIN(NVALMAX)      ! Surface albedo
174 REAL*8 KHAT(LLPAR)        ! Clear sky scattering weights
175 REAL*8 ACLR      ! Clear sky albedo
176 REAL*8 ACLD      ! Cloudy sky albedo
177 REAL*8 KHATCLD(LLPAR)     ! Cloudy sky scattering weights
178 REAL*8 SUM
179 REAL*8 FLAND          ! Land fraction
180 REAL*8 S(LLPAR)       ! Shape factors
181 REAL*8 TGMIX(LLPAR)   ! Trace gas mixing ratio
182 REAL*8 AERPROF(LLPAR,NAER) ! Aerosol profile
183 REAL*8 AIRMIX(LLPAR)
184 REAL*8 AVETMP        ! Effective trace gas trop temperature
185 REAL*8 AIRSIGMA, TGSIGMA, TMPSIGMA, WEIGHT
186 REAL*8 AMF(NVALMAX), AMFCLD(NVALMAX), AMFCLR(NVALMAX)
187 REAL*8 TRAD, WCLR(NVALMAX), WCLD(NVALMAX)
188 REAL*8 DSIGMA(LLPAR)
189
190 REAL*8 SACL(NVALMAX), SACL(NVALMAX) ! for saving
191 REAL*8 SS(NVALMAX,LLPAR)
192 REAL*8 SFLAND(NVALMAX)
193 REAL*8 SKHAT(NVALMAX,LLPAR)
194 REAL*8 SKHATCLD(NVALMAX,LLPAR)
195
196 REAL*8 MPRESS(LLPAR)
197
198 REAL*8 AVGRAD
199 REAL*8 MA
200 REAL*8 G
201
202 DATA MA      /0.02897D0/      ! Molecular weight of air kg/mol.
203 DATA AVGRAD /6.022D23/       ! Avagadros number
204 DATA G       /9.8065D0/
205
206 C
207 C User input
208 C
209
210 READ ( 5, '(A)' ) DATAFILE      ! File containing slant columns
211 READ ( 5, '(A)' ) FOLDERMATCH   ! Folder of MATCH txt files
212 READ ( 5, * ) DAYNO             ! Day of month
213 READ ( 5, * ) MO                ! Month
214 READ ( 5, * ) YR                ! Year
215 READ ( 5, '(A)' ) OUTFILE      ! Output file
216 READ ( 5, * ) TG.TYPE
217
218 C
219 C Read MATCH data
220 C a) Profiles of SO2
221 C
222

```

```

223     VAR = 'SO2_CM'
224
225     CALL READ_MATCHFD( LUN, FOLDERMATCH, VAR, YR, MO,
226 &                     DAYNO, IIPAR, JJPARG, NTOT, LLEFF,
227 &                     LONGSQ, LATISQ, ARRAY      )
228
229     C First we initialize variable with zeros and then we complete with the
230     C effective level of the model (LLEFF variable in CMN_SIZE file
231
232     TG = 0.0D0
233     TG(:,: ,1:LLEFF) = ARRAY
234     C     DO LEV = 1, LLEFF
235     C
236     C     TG(:,: ,LEV) = ARRAY(:,: ,LEV)
237     C
238     C     ENDDO
239
240     C-----
241     C b) Surface Pressure
242     C-----
243
244     VAR = 'PS'
245
246     CALL READ_MATCHFD( LUN, FOLDERMATCH, VAR, YR, MO,
247 &                     DAYNO, IIPAR, JJPARG, NTOT,
248 &                     LONGSQ, LATISQ, ARRAY2      )
249
250     C Surface pressure in hPa (it comes in Pa)
251
252     PS = ARRAY2/100
253
254
255     C-----
256     C c) Temperature
257     C-----
258
259     VAR = 'T'
260
261     CALL READ_MATCHFD( LUN, FOLDERMATCH, VAR, YR, MO,
262 &                     DAYNO, IIPAR, JJPARG, NTOT, LLEFF,
263 &                     LONGSQ, LATISQ, ARRAY      )
264
265     TMP = 0.0D0
266     TMP(:,: ,1:LLEFF) = ARRAY
267
268     C-----
269     C d) Aerosol (In this work we didn't add aerosol to the AMF code
270     C-----
271
272     ARSL(:,: ,: ,:) = 0.0D0
273
274
275     C-----
276     C Read the aerosol parameters
277     C-----
278

```

```

279     OPEN ( FILE = 'jv_spec.dat', UNIT = LUN,
280 &        FORM = 'FORMATTED', STATUS = 'OLD')
281     READ(LUN,*) !Header
282     DO N = 1, NAER+1
283         READ(LUN,*) !Aerosol label
284         DO I = 1, NWL
285             READ(LUN,*) WL(I),QEXT(I,N),RAA(I,N),ASSA(I,N),
286 &             (PHFCN(J,I,N),J=0,7)
287         ENDDO
288     ENDDO
289     CLOSE ( LUN )
290
291 C-----
292 C Read in UV surface albedos (In this work will be constant
293 C same value that the operational, Krotkov et al., 2008)
294 C-----
295
296     ALBD = 0.050D0
297
298 C-----
299 C Land Fraction
300 C-----
301
302     FRCLND = 1.0D0
303
304 C-----
305 C Start reading the OMI ascii files
306 C-----
307
308     SLEN = INDEX ( DATAFILE, ' ' ) - 1
309 C     WRITE(*,*) 'Reading file ', DATAFILE(1:SLEN)
310
311     OPEN ( FILE = DATAFILE,
312 &        UNIT = LUN,
313 &        FORM = 'FORMATTED',
314 &        STATUS = 'OLD')
315
316 C This "DO" command read the header and left the file
317 C ready to read the variables.
318     DO I = 1, 49
319         READ (LUN, *)
320     ENDDO
321
322 C =====
323 C Read LIDORT input file
324 C =====
325     CALL LIDORT_V23EINPUT
326 &     ( 'amfgas_lidortinput.vza',
327 &     'ACTIVEGAS_ERRORFILE', STATUSINPUTREAD )
328     IF ( STATUSINPUTREAD .NE. LIDORT_SUCCESS ) THEN
329         STOP ' Problems encountered with input read '
330     ENDIF
331
332 C read USA ML atmosphere
333     OPEN(1,FILE='usaml.ztp.dat',STATUS='OLD')
334     DO J = 1, NUSAML

```

```

335         J00 = NUSAML - J + 1
336         READ(1,*)USAML.ZZZ(J00),USAML.TTT(J00),USAML.PPP(J00)
337         USAML.LNP(J00) = DLOG(USAML.PPP(J00))
338     ENDDO
339     CLOSE(1)
340 C =====
341 C
342 C =====
343
344 C
345 C First we read the OMI ascii file with all the variables
346 C =====
347
348     DO LINE = 1, NVALMAX
349         READ(LUN, 100,END=900)
350 &     DATESTR(LINE), ORBNUM(LINE),
351 &     CTP(LINE), LATC(LINE),
352 &     LONC(LINE), SZA(LINE),
353 &     VZA(LINE), J1(LINE),
354 &     J2(LINE), J3(LINE),
355 &     J4(LINE), I1(LINE),
356 &     I2(LINE), I3(LINE),
357 &     I4(LINE),
358 &     SO2PBL(LINE),
359 &     SO2TRL(LINE),
360 &     SO2TRM(LINE),
361 &     SO2STL(LINE),
362 &     O3TOT(LINE),
363 &     CHISQ(LINE),
364 &     CLF(LINE),
365 &     ECLF(LINE),
366 &     TPRESS(LINE),
367 &     THEIGHT(LINE),
368 &     UVIDX(LINE),
369 &     SO2IDX(LINE,:),
370 &     REF331(LINE),
371 &     RESWL(LINE,:),
372 &     RESADWL(LINE,:)
373
374     ENDDO
375
376 900     CONTINUE
377
378         MAXLINE = LINE-1
379         CLOSE ( LUN )
380
381         WRITE(6,*) '=====',
382         WRITE(6,*) 'Read in ',
383         WRITE(6,*) DATAFILE(1:SLEN)
384         WRITE(6,*) maxline
385         WRITE(6,*) '=====',
386 C =====
387 C Starts the main calculation
388 C =====
389
390     DO LINE = 1, MAXLINE

```

```

391
392 C      initialize aux variables
393       TGAUX=0.0D0
394       PSAUX=0.0D0
395       TMPAUX=0.0D0
396       INSIDEM=0.0D0
397
398 C-----
399 C Find the points of the grid inside of the pixel of OMI
400 C-----
401       DO J = 1, JJPAR
402         DO I = 1, IIPAR
403
404           CALL MATCHSEEK( I1 (LINE) ,
405 &             I2 (LINE) , I3 (LINE) ,
406 &             I4 (LINE) , J1 (LINE) ,
407 &             J2 (LINE) , J3 (LINE) ,
408 &             J4 (LINE) ,
409 &             LONGSQ(I , J) ,
410 &             LATISQ(I , J) ,
411 &             INSIDE           )
412
413           IF (INSIDE) THEN
414
415             INSIDEM(I , J) = 1
416             TGAUX = TG(I , J , :) + TGAUX
417             PSAUX = PS(I , J) + PSAUX
418             TMPAUX = TMP(I , J , :) + TMPAUX
419
420           ELSE
421
422             INSIDEM(I , J) = 0
423
424           END IF
425
426         ENDDO
427       ENDDO
428
429       DUM = SUM(INSIDEM)
430
431       IF ((DUM .GT. 0) .AND. (SUM(TGAUX) .GT. 0)) THEN
432
433 C-----
434 C Variables for LIDORT
435 C-----
436
437       FLAND = 1.0D0
438
439       AERPROF(: , :) = ARSL(1 , 1 , : , :)
440
441       SPIN(LINE) = PSAUX/DUM
442
443       SAIN(LINE) = ALBD
444
445 C-----
446 C Calculate Eta Levels for GEOS.4

```

```

447 C
448 #if defined( MATCH )
449     MSIGMAE(1) = ETA.A(1)/SPIN(LINE) + ETA.B(1)
450     DO LEV = 1, LLPAR-1
451         MSIGMAE(LEV+1) = ETA.A(LEV+1)/SPIN(LINE) + ETA.B(LEV+1)
452         MSIGMA(LEV) = (MSIGMAE(LEV) + MSIGMAE(LEV+1) ) / 2.0d0
453     ENDDO
454     MSIGMAE(LLPAR+1) = 0.0d0
455     MSIGMA(LLPAR)=(MSIGMAE(LLPAR)+MSIGMAE(LLPAR+1) )/2.0d0
456 #endif
457
458 C
459 C Mixing ratio for air and Trace Gas
460 C
461 C Average of the profiles inside the pixel
462     TGMIX = TGAUX/DUM
463
464     DO LEV = 1, LLPAR
465         AIRMIX(LEV) = 1.0D0
466         TGMIX(LEV) = TGMIX(LEV) *1.0E-9
467     ENDDO
468
469 C Scale optical thickness values to be comparable to ISCCP
470     TCOT = 80.0/4.0
471
472 C Change from REAL*4 to REAL*8
473     RSZA = SZA(LINE)
474     RVZA = ABS(VZA(LINE))
475     RCOT = TCOT
476 C     RSTOZN = O3TOT
477 C We use the same Total Ozone for the operational Value in DU
478     RSTOZN = 325.0D0
479
480 C
481 C Get weighting kernel for clear sky case
482 C
483
484     CALL RLIDORT( SPIN(LINE) ,SAIN(LINE) ,
485     &             RSZA ,TG.TYPE,0.0D0,900.0D0,
486     &             TGMIX,KHAT,ACLR,RVZA,
487     &             FLAND,AERPROF, .FALSE. ,
488     &             RSTOZN)
489
490 C
491 C Compute total column of air , Trace Gas,
492 C TG Weighted Mean Temperature
493 C
494     AIRSIGMA = 0.0D0
495     DO LEV = 1, LLPAR
496         DSIGMA(LEV) = MSIGMAE(LEV) -
497     &             MSIGMAE(LEV+1)
498         AIRSIGMA = DSIGMA(LEV)*AIRMIX(LEV) + AIRSIGMA
499     ENDDO
500
501     TGSIGMA = 0.0D0
502     TMPSIGMA = 0.0D0

```

```

503         DO LEV = 1, LLEFF
504             WEIGHT = DSIGMA(LEV)*TGMIX(LEV)
505             TGSIGMA = WEIGHT + TGSIGMA
506             TMPSIGMA = WEIGHT*TMP(IUSE,JUSE,LEV) + TMPSIGMA
507         ENDDO
508         AVETMP = TMPSIGMA/TGSIGMA
509
510     C -----
511     C Compute S function
512     C -----
513
514         DO LEV = 1, LLEFF
515             IF ( TGMIX(LEV) .GT. 0.0D0 ) THEN
516                 S(LEV) = TGMIX(LEV)
517                 S(LEV) = S(LEV)/
518             &                 (TGSIGMA/AIRSIGMA)
519             ELSE
520                 S(LEV) = 0.0D0
521             ENDIF
522         ENDDO
523
524     C Check that S integrates to unity – use AMF variable to check this
525     AMF(LINE) = 0.0D0
526     DO LEV = 1, LLEFF
527         AMF(LINE) = DSIGMA(LEV)*S(LEV)
528     &         + AMF(LINE)
529     ENDDO
530
531     C Allow for numerical error (especially when using REAL precision)
532     IF ( AMF(LINE) .GT. 0.99 .AND.
533     &     AMF(LINE) .LT. 1.01) THEN
534     ELSE
535         WRITE(6,*) 'S function doesnt integrate one'
536         WRITE(6,*) AMF(LINE)
537         STOP
538     ENDIF
539
540     C -----
541     C Compute air mass factor
542     C -----
543         AMFCLR(LINE) = 0.0D0
544
545         DO LEV = 1, LLEFF
546             WEIGHT = 1
547             AMFCLR(LINE) = (DSIGMA(LEV)*KHAT(LEV)*
548         &                 S(LEV)*WEIGHT) + AMFCLR(LINE)
549         ENDDO
550
551     C Compute vertical column in molecules per m2
552     GEOS_VC(LINE) = ((AVGRAD*(SPIN(LINE)-PTOP))/
553     &         (G*MA) * TGSIGMA)/100.0D0
554
555     C             write(6,300) GEOS_VC(LINE)
556     300     FORMAT(e15.4)
557
558     C For output file

```

```

559         SACLR(LINE) = ACLR
560         SFLAND(LINE) = FLAND
561
562 C We are not using the sensitivity against clouds
563
564         AMF(LINE) = AMFCLR(LINE)
565
566 C         write(6,301) amf(line)
567 301    FORMAT(f10.4)
568         DO LEV = 1,LLPAR
569             SS(LINE,LEV) = S(LEV)
570             SKHAT(LINE,LEV) = KHAT(LEV)
571         ENDDO
572
573
574         END IF ! dum>0 y sum(tg)>0
575
576 ENDDO ! Main calculation
577
578 302    FORMAT(2(1x,g12.5),1x,f10.4,1x,e15.4)
579
580 C -----
581 C Open output file - used to write out vertical columns
582 C -----
583 OPEN ( FILE = OUTFILE,
584 &      UNIT = OLUN,
585 &      STATUS = 'UNKNOWN' ,
586 &      FORM = 'FORMATTED' )
587
588 IF ( NOOBS ) THEN
589     WRITE( 6, * ) '==No suitable observations found=='
590 ELSE
591     DO LINE = 1, MAXLINE
592
593         WRITE(OLUN,1003)
594 &      DATESTR(LINE) , ORBNUM(LINE) ,
595 &      CTP(LINE) , LATC(LINE) ,
596 &      LONC(LINE) , SZA(LINE) ,
597 &      VZA(LINE) , J1(LINE) ,
598 &      J2(LINE) , J3(LINE) ,
599 &      J4(LINE) , I1(LINE) ,
600 &      I2(LINE) , I3(LINE) ,
601 &      I4(LINE) ,
602 &      SO2PBL(LINE) ,
603 &      SO2TRL(LINE) ,
604 &      SO2TRM(LINE) ,
605 &      SO2STL(LINE) ,
606 &      O3TOT(LINE) ,
607 &      CHISQ(LINE) ,
608 &      CLF(LINE) ,
609 &      ECLF(LINE) ,
610 &      TPRESS(LINE) ,
611 &      THEIGHT(LINE) ,
612 &      UVIDX(LINE) ,
613 &      SFLAND(LINE) ,
614 &      SACLR(LINE) ,

```

```

615 &          SPIN(LINE) ,
616 &          GEOS_VC(LINE) ,
617 &          AMF(LINE) ,
618 &          SS(LINE,:) , SKHAT(LINE,:)
619
620         ENDDO
621     ENDIF
622
623         CLOSE ( OLUN ) ! Close output file
624
625
626 40     FORMAT(" Problem with the model shape integrating to unity")
627 101   FORMAT( '=====',
628 &          '=====' )
629 100   FORMAT(a12, 1x, a6, 1x, I3, 1x, 12(1x, g12.5) ,
630 &          4(1x, f14.6) , 11(1x, f10.3) , 12(1x, f14.6) ,
631 &          12(1x, f14.6) , 1x g12.6 )
632
633 1000  FORMAT(i5 , i3 , 3 e11.3 , 2 f7.2 , f9.4 , 2 f9.3 , 2 e11.3 , 9 f7.2 ,
634 &          f8.2 , f9.5 , 2 f8.4 , f7.4 , e11.3)
635 1001  FORMAT(i9 , i5 , i3 , 2 e15.4 , 12 f10.4 , e15.4 , 5 f10.4 , 90 f10.4)
636 1002  FORMAT(i9 , e15.4 , 13 f10.4 , e15.4 , 9 f10.4 , 90 f10.4)
637 1003  FORMAT(a12, 1x, a6, 1x, I3, 1x, 12(1x, g12.5) ,
638 &          4(1x, f14.6) , 7(1x, f10.3) , 2(1x, f10.4) , 1x,
639 &          f12.4 , 1x, e16.5 , 1x, f15.6 , 120(1x, f10.4) )
640
641     STOP
        END

```

# Apéndice B

## Manual HIRLAM

El siguiente anexo es una guía para correr el modelo meteorológico HIRLAM (Undén et al., 2002) en el nuevo cluster instalado en las dependencias del *Centro de Modelamiento Matemático* (CMM), que tiene por nombre *Levque*. El manual está escrito en inglés, pues fue realizado en conjunto con Martynas Kazlauskas del Servicio Hidrometeorológico de Lituania (LHMS, <http://www.meteo.lt/>) y se facilitaba la realización del mismo.

### B.1. HIRLAM: How to run the model in Levque?

This section presents instruction to make a successful run on CMM cluster, Levque. This manual includes a tar package that includes the necessary data and scripts to perform the simulation. The manual assume that you have an account on the Levque system, if you do not have one, please send an email to Juan Carlos Maureira [jcm@dim.uchile.cl](mailto:jcm@dim.uchile.cl) and follow the instructions that he will provide you. The installation is made using a terminal on Linux/Mac O.S. or using any software to connect remotely from your computer in Windows like *Putty* (<http://putty.softonic.com/>). During the text I will describe the installation process as I did it on my account in Levque:

```
fcarrasco@development.dim.uchile.cl
```

so my \$HOME folder will be at

```
$ /home/uchile/cmm/fcarrasco
```

It is important to mention that the instructions assume that you have minimum knowledge of manipulate/copy and work with files using a terminal. Before we start with the instruction, it is important that you know that for a meteorological simulation you primary need boundary conditions, climatological data and observation data in case you want to perform an assimilation experiment. It is also important that if you want to change the domain, you need to generate appropriated climate files, boundary file and observational files that adapt correctly to your new domain. Later we will point on the script that you have to modified in order to change the domain for your experiment.

First, we present a list of programs that you need in order to install and work with model data, boundary conditions, etc.:

- **Perl - tk:** Which is toolkit that works with perl language in order to make better GUI interfaces. The model uses this toolkit to generate an interface between very user friendly. This is not installed in the cluster, so you have to install it in your HOME folder following the instruction on the website: <http://www.perltk.org/>. After you installed, add to your script `.bashrc` the following line:

```

1 #Adding to perl@inc path, ass perl-tk is installed into non-system
  folder now
2 PERL5LIB=/usr/lib64/perl5/site_perl/5.8.8/x86_64-linux-thread-multi:/
  usr/lib/perl5/site_perl/5.8.8:/usr/lib/perl5/site_perl:/usr/lib64/
  perl5/vendor_perl/5.8.8/x86_64-linux-thread-multi:/usr/lib/perl5/
  vendor_perl/5.8.8:/usr/lib/perl5/vendor_perl:/usr/lib64/perl5
  /5.8.8/x86_64-linux-thread-multi:/usr/lib/perl5/5.8.8:/home/uchile/
  cmm/fcarrasco/install/perl.tk:/home/uchile/cmm/fcarrasco/install/
  perl.tk/arch;
3
4 export PERL5LIB

```

- **GrADS:** This program alouds you to visualize, manipulate of earth science data. The last version 2.0.a8 works with the grib format that HIRLAM use, but you have to compiled from the source (this is better because the version that you will use it is adapted to the system configurations). Ask for system help and compilation with Juan Carlos Maureira. You can download the program from the website: <http://www.iges.org/grads/>.

After you verified that you have the programs then you have to untar the file of the model at your \$HOME directory. You can use the following command in terminal:

```

1 tar -xvf file.tar

```

This will make appear the following folders in you \$HOME directory:

- **bin:** In this folder you will find the script `hirref7.3` that load all the variable folder name that the model use to go through boundary, climatological data, etc.
- **hirlam\_release:** This folder contains the model versions. Nowadays we are working with the 7.3 version, which was modified to compile by one our computer engineer J. Le Fillâtre ([jfillatre@dim.uchile.cl](mailto:jfillatre@dim.uchile.cl)). Currently the model HIRLAM group has developed the 7.4 version, which hasn't test on the Levque system.
- **hl\_home:** This is the folder where you place your experiments. You will find as an example the folder `EXP1` which corresponds to an experiment run on Levque. `EXP1` contains the following folders:
  - `config-sh:` The folder contains three scripts: `config.levque-gnu`, `Hirlam` and `Main`. These scripts are for configuration of the compiler and to facilitate the model run through the analysis and forecast system.

- *scripts*: This folder contains the scripts: 3DVARan, Env\_domain, Env\_expdesc, Env\_input, MakeStrategy.pl, Postpp, Prog, VARinput and submission.db. These scripts are for model setup and to launch the model into the system.
- *src*: That contains the folders config and util. These folder contains other configuration scripts for HIRLAM, like using other compilers.
- ***scratch***: This folder is for save the files like climatological data and boundary conditions. It also contains the place where the results are created. It is one of the main folders that you have to consider. It has two folders inside that we describe below:
  - *hl\_arc*: This folder contains the Observation, Boundary and Climate files. You will find that it's created folder EXP1, BND and OBS. BND is for boundary conditions and OBS y for observational data that is used for assimilation. Inside EXP1 you will find the folder ClimateFiles that contains the climate data for the domain (Warning: When you attempt to do another run, please use the same name for ClimateFiles, DO NOT change that name, because the model assume that name).
  - *hl\_home*: This folder is used by the model to create the executables when the model compiles and create the result for each forecast cycle. After this process the model moves the result in the *scratch/hl\_arc/EXP1/*.

Now that we have the folder description, we now described the scripts that you need to manipulate/configured/modified to perform a successful experiment. The main thing that you have to configured are the folders, because you need to adapt it to your account \$HOME folder. We now give a brief description of the scripts that you have to change these and where are located:

- *hirref7.3*: You should adapt the folder where the *hirlam\_release* folder. This must be done between line 30 and 32.
- *Hirlam*: This script set default HIRLAM reference location and is located in the *hl\_home/EXP1/config-sh*.
- *Main*: This script is to use the interface to facilitate the running of the Hirlam analysis and forecast system. It is located in *hl\_home/EXP1/config-sh*.
- *config.levque-gnu*: This script describe Levque configuration with the GNU compilers. It is located in *hl\_home/EXP1/config-sh*. You can find more configuration files inside the folder *\$HOME/hirlam\_release/7.3.bf1-DIM/src/config*. The filenames are like config.yourPlattform, so you can change compilers and other system variables.
- *Env\_domain*: This script is for definition for experiment domain/grid/area. It is located in *hl\_home/EXP1/scripts*.
- *Env\_expdesc*: This script is for experiment and cycle configuration. It is located in *hl\_home/EXP1/scripts*.

- *Env\_input*: This script has the folder where to locate the boundary, climate data and observations. It is located in *hl\_home/EXP1/scripts*.
- *Postpp*: This script is to produce postprocessed files. It is located in *hl\_home/EXP1/scripts*.
- *Prog*: This script is to run the forecast model. It is located in *hl\_home/EXP1/scripts*.
- *submission.db*: This script is to define the jobs and their submission sequences. It is located in *hl\_home/EXP1/scripts*. This script is one of the important ones because it manages how many resources (cores) you use from the cluster. I extract some of the important pieces of the script that you will have to consider when a new experiment is made, the first extract is from the lines between 60 and 85 which shows how many cores you use for every forecast cycle, in this case you are using a total of 12 cores with 4 for x component and 3 for y component. You can also use a different number of cores for the Post-processing with the *Postpp* script. In this case we are using 6 nodes for this task and it is equal to 3 on x component and 2 for y component. In this case I will keep the number 1 on the *LOCALNPROC* and *LOCALNODES* variable, because they don't have any influence on the number of nodes (at least it works in this way in Levque). The variable *LOCALQUEUE* is the queue where the work will be, in this case "all.q".

```

1 #Domain decomposition, Tasks etc. These might be loaded from the
   environment also
2 $LOCALNPROC = 1;
3 $LOCALNODES = 1;
4 $LOCALNTASKS = 12;
5 $LOCALNPROCX = 4;
6 $LOCALNPROCY = 3;
7 #Use your own if you want different amount of CPU's for Postpp
8 $LOCALNPROC1 = 1;
9 $LOCALNODES1 = 1;
10 $LOCALNTASKS1 = 6;
11 $LOCALNPROCX1 = 3;
12 $LOCALNPROCY1 = 2;
13 #Use this separately for DA if any
14 $LOCALNODES4D = 10;
15 $LOCALNPROCX4D = 2;
16 $LOCALNPROCY4D = 5;
17 $LOCALNTASKS4D = 2;
18 #We don't use threading now
19 $OMP_NUMH = 1;
20 # Add this to represent time accordingly to your scheduler
21 $LOCALCLOCK1 = "0:35:00";
22 $LOCALCLOCK2 = "0:35:00";
23 $LOCALQUEUE = "all.q";

```

The variable \$OMP\_NUM\_H

An the other part of the script that you have to check is between line 644 and 688, that contains the description of the shell script that will be on the queue:

```

1 #####FC: Eliminate the queue name acord to changes in the system.
2 ## $DUMMY -q %QUEUENAME%
3 $DUMMY -pe openmpi %TASKS_PER_NODE%
4 $DUMMY -o $joboutL
5 $DUMMY -j n
6 $DUMMY -M felix.marcial@gmail.com
7 $DUMMY -m aes
8 $DUMMY -S /bin/sh
9 $DUMMY -N %JOBNAME%
10 $DUMMY -V
11 # This job's working directory
12 source /etc/profile.d/modules.csh
13 module load openmpi-gcc44/1.4.3
14 ulimit -S -s unlimited # 8 GB Stack
15 ulimit -S -m unlimited # 4 GB memlock
16 ulimit -S -d unlimited # data area
17 ulimit -a

```

One possible mistake that can have with this part is that your number of nodes in x and y for Forecast cycle cannot coincide with the total. You can see the wiki website:

<https://hirlam.org/trac/wiki/HirlamHowto/Forecast/Error#HirlamHOWTOs>

where is explained in detail the mistake. The way to solve it is to make that the product between the variables LOCALNPROCX and LOCALNPROCY must be equal to LOCALNTASKS.

When we checked all the scripts, we are “Ready” to lunch the experiment. One important thing is that using one command the model will be compiled and then it will be launch. Here you will find the instructions to perform the experiment. This instructions considered that you have created all the necessary folder as it is described in the first part of this manual (e.g. EXP folder inside the *hl\_home* folder.

1. The first thing you have to do is load the variables of the compiler. You can do this using the module option that is included in the Levque system and it is described in the manual of the cluster (you have to ask for this with Juan Carlos Maureira, because there aren't an official version). To do this write in the terminal the following command:

```
1 module load openmpi_gcc44 /1.4.3
```

2. The next step that you have to do is load the folder name variables of the model, like \$HL\_DATA. And you can do this by pointing where you *hirref7.3* script is. In the terminal you have to do:

```
1 bin/hirref7.3 EXP
```

which copy the scripts to run the model for an experiment folder name EXP (you can change this but you HAVE to be consistent!!).

3. Now you can run the model (remember to create the folder at the it \$HOME/hl\_home directory with the name of your experiment. In order to run the model you can several ways to do it, depending of what you need. The basic way to run the model is by the following command in the terminal from the it \$HOME/hl\_home folder:

```
1 config-sh/Hirlam start DTG=2008092000 DTGEN=2008092018 LL=06 PLAYFILE=
  BUILD
```

which compile the model (PLAYFILE option) and then run the model between September 20 2008 between 00 and 18 hours. This will make you appear on your screen a window like the one you can see in the left side of the figure B.1. In this case there is an error, and the good thing is that the window will show you where is the mistake and looked at log file. If you want to disable the window you can use this command:

```
1 config -sh/Hirlam start DTG=2008092000 DTGEN=2008092018 LL=06 PLAYFILE=
BUILD mSMS_WEBPORT=0 mXCdp=DISABLE
```

We do NOT recommend to use this option at your first try, because an easy way to check where the mistake is, is by using the Perl-tk window. In case you have a failure during the running experiment and you want to start exactly from the cycle you stop you can use the following command that will automatically start from the cycle you were at:

```
1 Hirlam prod DTGEN=2008092018
```

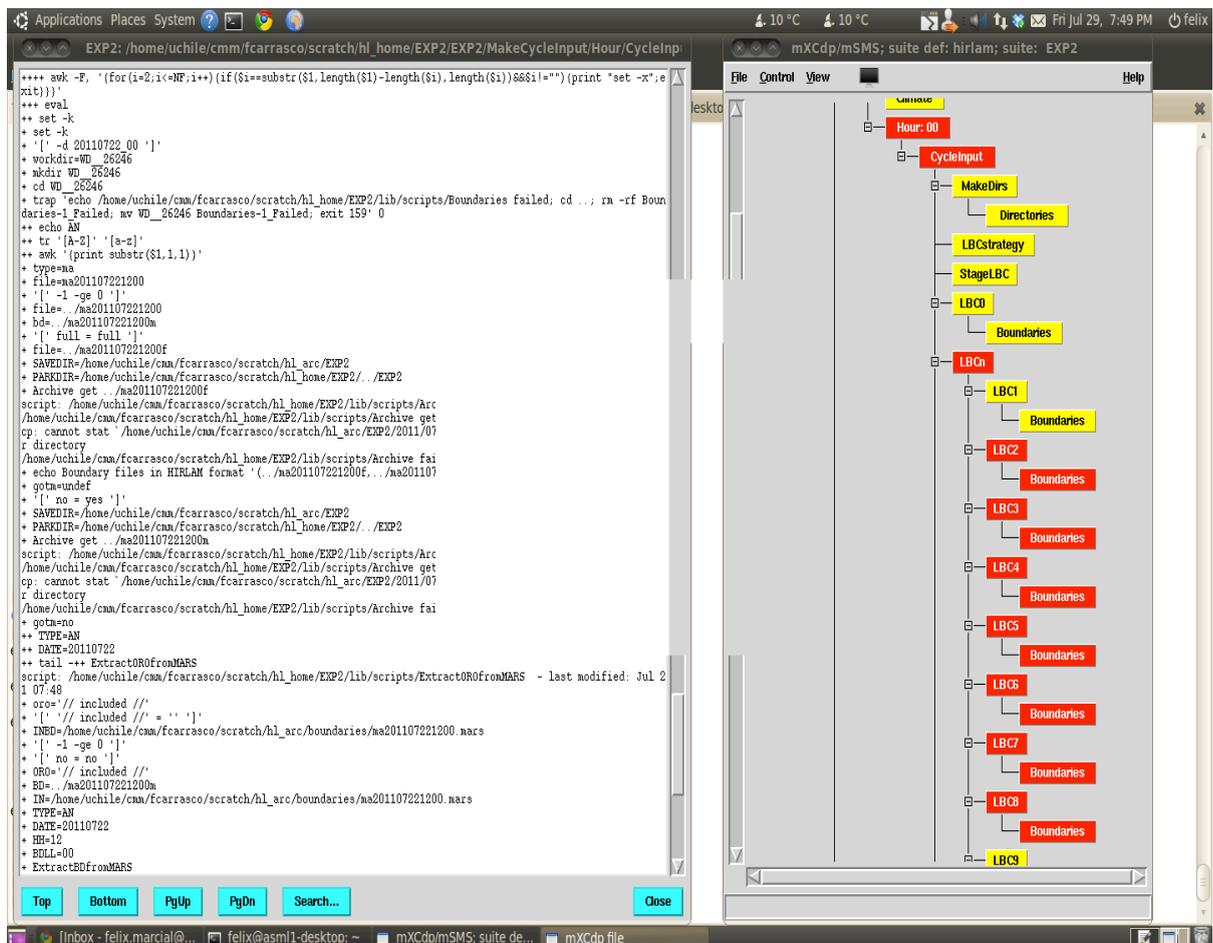


Figura B.1: Perl-tk window with the model steps for a failure case.

A successful experiment will look like the figure B.2. Hopefully you will have a window like the figure B.2. Any doubt you can send me an email at *felix.marcial@gmail.com*.

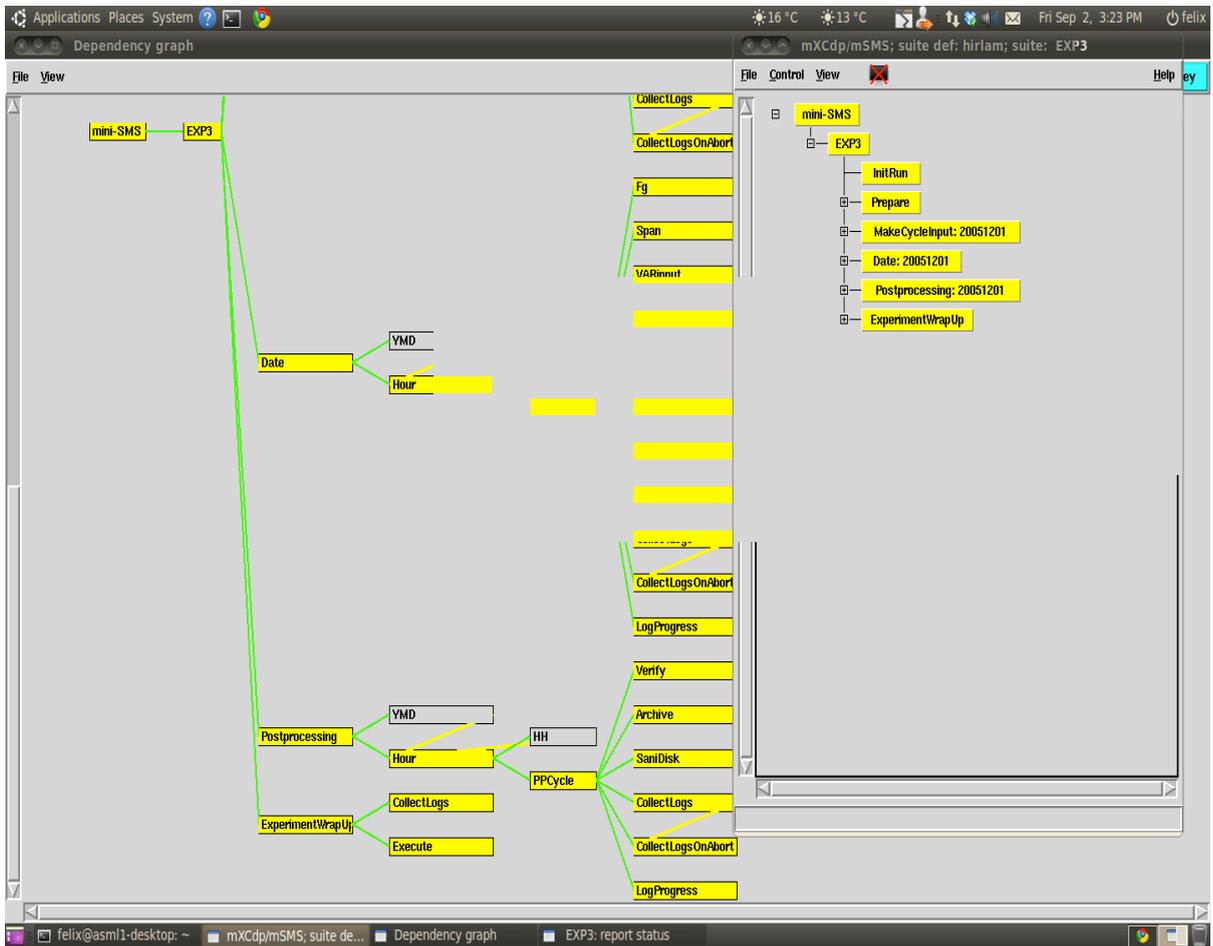


Figura B.2: Perl-tk window with the model steps for a successful experiment.

You have to considerer that this is just a simple way to run the model. The details of the numerical methods, equations and scientific thing you can find it in the Documentation of Hirlam ([http://hirlam.org/index.php?option=com\\_docman&task=doc\\_details&gid=308&Itemid=139](http://hirlam.org/index.php?option=com_docman&task=doc_details&gid=308&Itemid=139)) The details of the setup of the model and how to run it, you can find it in wiki site at <https://hirlam.org/trac/wiki>. In this case you need an account to check the wiki so you need to get in contact with the developers of HIRLAM Xiaohua Yang (xiaohua@dmi.dk).