



**UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE GEOFÍSICA**

IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO CCATT-BRAMS SOBRE LA ZONA CENTRAL DE CHILE Y SU EVALUACIÓN

**PROYECTO DE GRADO PARA OPTAR AL GRADO DE MAGISTER EN
METEOROLOGÍA Y CLIMATOLOGÍA**

RODRIGO ALEJANDRO ARROYO HERNÁNDEZ

**PROFESORES GUÍA:
LAURA GALLARDO KLENNER
KARLA MARIA LONGO**

**MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
MELITTA FIEBIG WITTMAACK
ROBERTO RONDANELLI ROJAS**

**SANTIAGO DE CHILE
SEPTIEMBRE 2010**

Agradecimientos

Quiero agradecer a Laura Gallardo por la oportunidad dada al permitirme acceder al proyecto SAEMC, el cual me brindó el soporte necesario para realizar este Magister. También quisiera agradecer a la Dirección Meteorológica de Chile por haberme facilitado el poder cursar el Magister siendo funcionario ahí. Agradezco al grupo GMAI de CPTEC quienes me ayudaron, en especial las veces que viajé ahí para instruirme por este trabajo y en forma particular a Marcelo Alonso por su dedicación, paciencia y amabilidad.

Agradezco a mis compañeros de trabajo, quienes me tuvieron la paciencia suficiente mientras duró todo este proceso y por sus sugerencias y correcciones a mi trabajo, en especial a Ricardo Alcañaz, quien se dio el tiempo de revisar detalladamente mi trabajo final y realizar valiosas sugerencias. También quisiera agradecerle en forma especial a Rodrigo Delgado todo el apoyo dado durante todo este periodo y su casi infinita paciencia, en especial por todos mis errores de capa 8.

También quiero agradecer a mis profesores del Magister, por su calidad excepcional. En particular quiero agradecer especialmente a Ricardo Muñoz, por sus clases, su dedicación y su claridad para transmitir conocimientos.

Finalmente el mayor agradecimiento del mundo a Tatiana, mi esposa, quién ha sido mi soporte emocional durante todo este tiempo, gracias por tu paciencia, amor y por entender que tenía que dedicar tanto tiempo a esto en desmedro del nuestro. Gracias mil.

This work was carried out with the aid of a grant from the Inter-American Institute for Global Change Research (IAI) CRN II 2017 which is supported by the US National Science Foundation (Grant GEO-0452325).

Índice general

| | |
|--|-----------|
| Resumen | 10 |
| 1 Introducción y planteamiento del problema | 11 |
| 1.1 Antecedentes | 11 |
| 1.2 Objetivo general | 14 |
| 1.3 Objetivos específicos..... | 14 |
| 1.4 Descripción de modelo CCATT-BRAMS | 16 |
| 1.4.1 Listado y descripción breve de las parametrizaciones del modelo..... | 18 |
| 1.4.2 Descripción de las parametrizaciones elegidas para estudio de sensibilidad..... | 20 |
| 1.4.2.1 Parametrizaciones de orografía..... | 21 |
| 1.4.2.2 Opciones de humedad de suelo inicial | 21 |
| 1.4.2.3 Parametrizaciones de turbulencia | 22 |
| Forma general | 22 |
| Distancia de grilla horizontal y vertical similar | 23 |
| Distancia de grilla horizontal mucho mayor que la vertical..... | 23 |
| Opciones para calcular Kmi y Khi | 24 |
| 1.5 Datos de entrada requeridos en el modelo | 24 |
| 1.6 Datos para evaluación de resultados del modelo | 28 |
| 1.7 Estudios previos sobre el comportamiento de la calidad del aire en Santiago | 30 |
| 1.7.1 Descripción breve del origen, estacionalidad y ciclos diarios del CO, O3 y NOx..... | 31 |
| 1.7.2 Estudios sobre las observaciones de ozono, sus precursores y otras especies | 31 |
| 1.8 Estudios previos en base a modelación numérica de la calidad del aire en Santiago ... | 34 |
| 1.8.1 Modelamiento de CO | 35 |
| 1.8.2 Modelamiento de O3 y precursores | 38 |
| 2 Sensibilidad de algunas opciones físicas disponibles en CCATT-BRAMS: topografía, humedad inicial de suelo y capa límite | 41 |
| 2.1 Introducción | 41 |
| 2.2 Historial de simulaciones previas..... | 41 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 2.3 | Sensibilidad de esquemas de topografía en Brams..... | 43 |
| 2.3.1 | Descripción del problema | 43 |
| 2.3.2 | Experimentos y comparaciones para la representación orográfica..... | 44 |
| 2.3.3 | Resultados..... | 45 |
| 2.4 | Sensibilidad del factor de humedad inicial de suelo de Brams | 49 |
| 2.4.1 | Descripción general | 49 |
| 2.4.2 | Experimentos y comparaciones..... | 50 |
| 2.4.3 | Resultados modelados de calor sensible y calor latente | 50 |
| 2.4.4 | Sensibilidad de la razón de mezcla de vapor de agua a 2m..... | 53 |
| 2.4.5 | Sensibilidad de la temperatura a 2m..... | 55 |
| 2.5 | Sensibilidad de altura de capa límite planetaria en Brams | 57 |
| 2.5.1 | Introducción | 57 |
| 2.5.2 | Experimentos realizados y resultados | 57 |
| | Ciclo diario de la altura de capa límite planetaria | 58 |
| 2.6 | Conclusiones generales | 61 |
| 3 | Configuración final de simulación y descripción de los métodos de verificación de resultados | |
| | 63 | |
| 3.1 | Introducción | 63 |
| 3.2 | Configuración espacial y temporal de las simulaciones..... | 63 |
| 3.3 | Variables meteorológicas y de calidad de aire a evaluar | 67 |
| 3.4 | Método de evaluación de resultados..... | 68 |
| 4 | Resultado de simulación de variables meteorológicas y dispersión | 70 |
| 4.1 | Introducción | 70 |
| 4.2 | Flujos superficiales de calor latente, sensible y altura de capa límite | 70 |
| 4.3 | Evaluación de temperaturas | 74 |
| 4.3.1 | Ciclo diario..... | 74 |
| 4.3.2 | Variabilidad interdiaria..... | 78 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 4.4 | Evaluación de razón de mezcla de vapor de agua | 81 |
| 4.4.1 | Ciclo diario | 81 |
| 4.4.2 | Variabilidad interdiaria..... | 83 |
| 4.5 | Resultado de simulación para el viento..... | 86 |
| 4.5.1 | Evaluación cualitativa del viento, vectores..... | 86 |
| 4.5.2 | Evaluación estadística de la magnitud..... | 87 |
| 4.5.3 | Variabilidad interdiaria de la magnitud | 89 |
| 4.6 | Conclusiones generales de la evaluación de variables meteorológicas | 90 |
| 4.7 | Resultado de simulación para CO | 93 |
| 4.7.1 | Distribución horizontal de la razón de mezcla | 93 |
| 4.7.2 | Distribución vertical de la razón de mezcla de CO | 96 |
| 4.7.3 | Comparación del ciclo diario observaciones - modelo..... | 100 |
| 4.7.4 | Comparación del ciclo diario observado para día de semana y fin de semana | 104 |
| 4.7.5 | Comparación del ciclo interdiario de CO..... | 105 |
| 4.7.6 | Comparación de resultados de razones de mezcla de CO con trabajos previos..... | 106 |
| 4.7.7 | Conclusiones sobre resultados de simulación de dispersión para CO..... | 109 |
| 5 | Resultados de simulación para O₃ | 111 |
| 5.1 | Introducción | 111 |
| 5.2 | Razones COV/NO _x del inventario local | 111 |
| 5.3 | Resultados de simulación fotoquímica – NO _x | 115 |
| 5.4 | Resultados de simulación fotoquímica – O ₃ , comportamiento temporal..... | 118 |
| 5.5 | Resultados de simulación fotoquímica – O ₃ , comportamiento espacial | 123 |
| 5.6 | Resultados de simulación fotoquímica – O ₃ , comparación de resultados | 125 |
| 5.7 | Conclusiones | 128 |
| 6 | Conclusiones finales | 130 |
| 7 | Trabajo posterior | 132 |

| | |
|---|-----|
| 8 Bibliografía | 133 |
| Anexo 1. Estructura de funcionamiento de CCATT-BRAMS | 137 |
| Anexo 2. Situación sinóptica predominante del periodo de simulación | 139 |
| Anexo 3. Ciclos diario observados y modelados de temperatura | 143 |
| Anexo 4. Serie de anomalías observadas y modeladas de temperatura | 146 |
| Anexo 5. Ciclos diario medios observados y modelados de razón de mezcla de vapor de agua .. | 150 |
| Anexo 6. Serie de tiempo de anomalías observadas y modeladas de vapor de agua..... | 152 |
| Anexo 7. Ciclos diarios de vector viento observado y modelado, datos desde z1..... | 154 |
| Anexo 8. Ciclos diarios de magnitud del viento observado y modelado, datos a 10m..... | 156 |
| Anexo 9. Corte vertical de razón de mezcla de CO, temperatura potencial y componente u y w. . | 158 |
| Anexo 10. Distribución espacial media de ozono, escala logarítmica | 163 |

Índice de figuras

| | |
|---|----|
| Figura 1. Esquema de la física que incluye del modelo CATT-BRAMS. | 17 |
| Figura 2. Distribución espacial de emisiones de CO sobre Santiago (Saide, 2008). | 27 |
| Figura 3. Ciclo diario de emisiones de CO del inventario de emisiones de Santiago. | 28 |
| Figura 4. Estaciones meteorológicas utilizadas en el estudio para la evaluación del modelo..... | 30 |
| Figura 5. Topografía de 1 km de resolución de la zona central del país y cortes latitudinales..... | 45 |
| Figura 6. Corte latitudinal de topografía A-A' en -33° | 45 |
| Figura 7. Corte latitudinal de topografía B-B' en -33.5° | 46 |
| Figura 8. Corte latitudinal de topografía C-C' en -33.8° | 46 |
| Figura 9. Corte longitudinal de topografía D-D' en $-71^{\circ}W$ | 47 |
| Figura 10. Ciclo diario promedio de calor sensible (azul) y latente (rojo) para simulaciones. | 52 |
| Figura 11. Ciclo H_o y L_e utilizando reanálisis CPTEC (a) y reanálisis NCEP (b)..... | 53 |
| Figura 12. Razón de mezcla de vapor de agua promedio observada y simulada..... | 54 |
| Figura 13. Temperatura observada y simulada usando distintas humedades de suelo..... | 56 |
| Figura 14. Ciclo diario de altura de PBL para esquema local y no-local de turbulencia..... | 59 |
| Figura 15. Ciclo diario de altura de PBL para distintos valores de humedad inicial de suelo..... | 60 |
| Figura 16. Dominios utilizados en las simulaciones. | 66 |
| Figura 17. Función de probabilidad acumulada empírica de test bootstrap para medias | 69 |
| Figura 18. Función de probabilidad acumulada empírica de test bootstrap para correlación..... | 69 |
| Figura 19. Ciclo diario medio de calor sensible y calor latente simulado por CCATT-BRAMS..... | 71 |
| Figura 20. Ciclo diario medio de altura de capa límite para CCATT-BRAMS. | 72 |
| Figura 21. Ciclo diario medio de temperaturas, t_{2m} y t_{z1} , estación de La Paz | 74 |
| Figura 22. Ciclo diario medio de temperaturas, t_{2m} y t_{z1} , estación de Codigua, de la zona rural. | 75 |
| Figura 23. Ciclo diario medio de temperaturas, t_{z1} , estación de Lo Prado, de altura. | 75 |
| Figura 24. Anomalías de temperaturas, La Florida, estación urbana. | 79 |
| Figura 25. Anomalías de temperaturas, El Paico, de la zona rural. | 79 |
| Figura 26. Anomalías de temperaturas, La Dormida, estación de altura..... | 79 |
| Figura 27. Ciclo diario medio razón de mezcla de vapor de agua, La Reina, estación urbana. | 81 |
| Figura 28. Ciclo diario medio razón de mezcla de vapor de agua, La Reina, de la zona rural..... | 81 |

| | |
|---|-----|
| Figura 29. Ciclo diario medio razón de mezcla de vapor de agua, Lo Prado, estación de altura. ... | 82 |
| Figura 30. Anomalías de razón de mezcla de vapor de agua, Pudahuel, estación urbana..... | 84 |
| Figura 31. Anomalías de razón de mezcla de vapor de agua, El Paico, estación de la zona rural. | 84 |
| Figura 32. Anomalías de razón de mezcla de vapor de agua, Lo Prado, estación de altura..... | 84 |
| Figura 33. Ciclo diario medio del vector viento, observado y modelado..... | 86 |
| Figura 34. Ciclo diario medio de magnitud del viento, Pudahuel (a) y Codigua (b)..... | 88 |
| Figura 35. Anomalía de magnitud del viento en estación urbana, rural y de altura | 90 |
| Figura 36. Distribución horizontal de razones de mezcla medias horarias de CO..... | 95 |
| Figura 37. Distribución vertical (latitud-Z) de razones de mezcla medias horaria de CO..... | 99 |
| Figura 38. Ciclos diarios medios de razón de mezcla de CO observada y modelada. | 102 |
| Figura 39. Ciclos de razón de mezcla de CO para un día de semana y un día de fin de semana. | 104 |
| Figura 40. Series de anomalías de razón de mezcla de CO observada y modelada..... | 105 |
| Figura 41. Razón COV/NO _x del inventario de emisiones de Santiago. | 113 |
| Figura 42. Isopletras de O ₃ en función de la razón COV/NO _x | 114 |
| Figura 43. Ciclos diarios medios de NO y NO ₂ observados y modelados. | 115 |
| Figura 44. Ciclo diario de razones de mezcla de NO observadas y simuladas. | 117 |
| Figura 45. Razones de mezcla de O ₃ , para estaciones de la zona centro y occidente..... | 118 |
| Figura 46. Razones de mezcla de O ₃ , para estaciones de la zona oriente. | 120 |
| Figura 47. Serie de tiempo razón de mezcla de O ₃ observada y modelada. | 120 |
| Figura 48. O ₃ (ppb) y campo de viento superficial modelada por CCATT-BRAMS..... | 124 |
| Figura 49. O ₃ (ppb) observado en mediciones hechas en La Parva, cordillera de Los Andes..... | 125 |

Índice de tablas

| | |
|---|-----|
| Tabla 1. Resumen de parametrizaciones disponibles en CCATT-BRAMS..... | 18 |
| Tabla 2. Resumen de parametrizaciones elegidas en CCATT-BRAMS, sin trabajo de sensibilidad. | 20 |
| Tabla 3. Especies contenidas en el inventario local de emisiones de Santiago..... | 27 |
| Tabla 4. Estaciones meteorológicas y de calidad de aire, ubicación, altitud y variables. | 29 |
| Tabla 5. Resumen de las características de los modelos utilizados para estudios previos de CO. | 37 |
| Tabla 6. Cronograma de simulaciones realizadas con CCATT-BRAMS..... | 43 |
| Tabla 7. Altitud modelada de algunas estaciones consideradas para la evaluación del modelo. ... | 49 |
| Tabla 8. Resultados cualitativos del test bootstrap para diferencia de medias t_{2m} | 77 |
| Tabla 9. Resultados cualitativos del test bootstrap para diferencia de medias t_{z1} | 78 |
| Tabla 10. Resultados del test bootstrap para significancia de correlación anomalías t_{2m} y t_{z1} | 80 |
| Tabla 11. Resultados del test bootstrap para diferencia de medias w_{2m} | 83 |
| Tabla 12. Resultados del test bootstrap para significancia de correlación anomalías w_{2m} y w_{z1} .. | 85 |
| Tabla 13. Resultados del test bootstrap para diferencia de medias de magnitud del viento 10m... | 89 |
| Tabla 14. Resultados del test bootstrap para diferencia de medias de razón de mezcla de CO. ... | 103 |
| Tabla 15. Correlación y desviación estándar observada y modelada, de CO diurno. | 106 |
| Tabla 16. Correlación y desviación estándar observada y modelada, de CO nocturno. | 106 |
| Tabla 17. Listado de COVs considerados en el análisis de razón COV/ NO _x | 112 |
| Tabla 18. Evaluación máximos diarios de O ₃ del modelo CCATT-BRAMS | 122 |
| Tabla 19. Evaluación máximos diarios de O ₃ del modelo CCATT-BRAMS | 123 |

Resumen

En este trabajo se implementa y validan los resultados de una primera aplicación de un modelo de calidad de aire que acopla módulos meteorológicos y de química atmosférica, sobre la cuenca de Santiago, para fines de aplicación ulterior como una herramienta operacional de pronóstico del tiempo químico en la Dirección Meteorológica de Chile, en adición a otras herramientas ya disponibles.

El modelo ha sido desarrollado en el Centro de Pronóstico del Tiempo y del Clima de Brasil (INPE-CPTEC) y se quiere que esta herramienta se convierta en una plataforma de desarrollo comunitario en América del Sur, para lo cual este trabajo ha constituido el proyecto piloto para la exportación del modelo a otras instituciones en la región. En este contexto, este trabajo ha ayudado a identificar las modificaciones en aspectos computacionales y físicos del código necesarias para el buen funcionamiento del mismo a escala urbana y sobre una zona de topografía compleja.

Aquí se muestra la evaluación sistemática del modelo con énfasis en la inicialización en los campos de humedad, representación de la capa límite y procesos de advección. Para ello se eligió un periodo de 2 semanas en enero de 2002, para el cual se simuló la dispersión de monóxido de carbono (CO), una traza químicamente pasiva a escala urbana y la formación fotoquímica de ozono (O₃) a partir de precursores. Estos resultados son comparados con observaciones disponibles en Santiago y con simulaciones del modelo MM5-Polyphemus, implementado de modo operacional en la Dirección Meteorológica de Chile. También fueron estudiados y evaluados aspectos tales como la razón entre compuestos orgánicos volátiles y óxidos de nitrógeno presente en el inventario local de emisiones y los resultados simulados de óxidos de nitrógeno, respectivamente.

Se concluye que el modelo es capaz de representar las características generales de la variabilidad meteorológica y química sobre la zona de estudio, haciéndolo pertinente como herramienta operativa para pronósticos del tiempo químico. Se considera, sin embargo, que su desempeño podría ser mejorado al incrementar su resolución espacial en la zona de estudio, así como ajustando las opciones físicas disponibles en el modelo.

1 Introducción y planteamiento del problema

1.1 Antecedentes

La Región Metropolitana de Santiago fue declarada como “Zona Saturada” para cuatro contaminantes atmosféricos: material particulado respirable, partículas totales en suspensión, monóxido de carbono (CO) y ozono (O₃) y como “Zona Latente” para dióxido de nitrógeno (NO₂), el 1 de Agosto de 1996 (PPDA, CONAMA-RM, en el marco de la Ley de bases del Medioambiente N° 19300, año 1994). Desde entonces, la Comisión Nacional del Medio Ambiente (CONAMA) inició la elaboración del Plan de Prevención y Descontaminación Atmosférica para la Región Metropolitana, el cual fue actualizado el 2008 (PPDA ACTUALIZACIÓN, CONAMA-RM).

La ciudad de Santiago, capital del país, cuenta con una población aproximada de 6 millones de habitantes y está situada cerca del centro de una planicie llamada cuenca de Santiago, la cual limita al norte con las montañas que forman el cordón de Chacabuco, al oeste con la Cordillera de la Costa, al este con la Cordillera de los Andes y al sur con la Angostura de Paine. Estas montañas conforman una barrera que bloquea el flujo horizontal del viento, disminuyendo notablemente la ventilación.

Por otra parte, la subsidencia del anticiclón semi-permanente del Pacífico sur oriental, la cual es reforzada ocasionalmente por eventos de vaguada costera, produce una extrema estabilidad en el perfil vertical de la atmósfera baja, restringiendo notablemente la profundidad de la capa de mezcla. Además, se debe añadir que en invierno la estabilidad se refuerza por efecto del menor calentamiento de la superficie del suelo y la mayor pérdida radiativa en las noches con cielos despejados (Garreaud *et al*, 2002).

Si a estos dos aspectos, orográficos y meteorológicos, agregamos las emisiones antrópicas (ver tabla 3) que genera una ciudad tan extensa como Santiago, se tienen condiciones propicias para la ocurrencia de episodios de contaminación.

En invierno, el principal problema de contaminación en Santiago proviene del material particulado, cuyas concentraciones sobrepasan varios días al año la norma establecida (Gramsch *et al*, 2006).

En verano, por otra parte, dado el predominio del anticiclón, cielos despejados, altas temperaturas y la presencia de precursores, se favorece la formación de ozono (O₃), ocurriendo episodios de contaminación cuyos valores superan los márgenes considerados saludables para las personas. Esta situación genera impactos nocivos sobre la salud, incrementando la tasa de mortalidad por enfermedades respiratorias y cardíacas (Levy *et al*, 2005).

En este contexto es relevante contar con herramientas que permitan diagnosticar y pronosticar la calidad del aire. La Dirección Meteorológica de Chile (DMC), con la motivación de extender su labor operativa más allá del pronóstico del tiempo tradicional, y considerando la importancia del pronóstico químico para ciudades con reconocidos problemas de calidad de aire, ha estado estos últimos años desarrollando capacidades en función de adquirir conocimientos e implementar herramientas operativas de predicción.

Para esto, la DMC en conjunto con la Universidad de Chile, participa en un proyecto relativo a la contaminación ambiental, SAEMC (*South American Emissions, Megacities and Climate*, <http://saemc.cmm.uchile.cl/>), que aborda multidisciplinariamente, la contaminación en las mega ciudades sudamericanas. Así, dentro del marco de este proyecto y con el apoyo de la Dirección General de Aeronáutica Civil, se ha estado trabajando en dos líneas de desarrollo, que involucran los sistemas de modelamiento POLYPHEMUS (Mallet *et al*, 2007) y CCATT-BRAMS (The Couple Aerosol and Tracer Transport model to the Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System, Freitas *et al*, 2009, Longo *et al*, 2010).

El trabajo de tesis ha consistido en implementar el modelo de pronóstico numérico CCATT-BRAMS en la macrozona central del país, específicamente en la cuenca de Santiago, y evaluar esta implementación dentro del marco del proyecto SAEMC. Entre los objetivos de dicho proyecto se cuenta la implementación de pronóstico operacional del tiempo químico conectado al mayor centro meteorológico de Sudamérica, esto es, el Centro de Previsión del Tiempo y Estudios Climáticos (CPTEC), dependiente del Instituto Nacional de Pesquisas Espaciales (INPE) ubicado en el Estado de Sao Paulo, Brasil. La función de este centro es realizar pronósticos del tiempo, climáticos, oceanográficos, hidrológicos, de calidad de aire, entre otros, para Brasil y Sudamérica, además del procesar y administrar datos de tipo satelitales y simulaciones numéricas generadas en sus sistemas de cómputo.

La zona central de Chile, donde se enfocarán las simulaciones de CCATT-BRAMS, es un área de terreno complejo, debido a la presencia de cordones montañosos, que encierran valles interiores donde se localizan centros urbanos como Santiago, Rancagua y las ciudades del valle

de Aconcagua. Esta región concentra cerca de la mitad de la población del país (www.ine.cl), con numerosas fuentes antrópicas de emisión, incluyendo centros urbanos, fundiciones de cobre, plantas de energía, etc.

1.2 Objetivo general

Evaluar la implementación del modelo CCATT-BRAMS sobre la zona central del país, con el fin de tener disponible en el futuro cercano una nueva herramienta operativa de pronóstico químico en la Dirección Meteorológica de Chile.

1.3 Objetivos específicos

- Definir las características espaciales y temporales de las simulaciones a realizar con el modelo CCATT-BRAMS, en función de capturar los aspectos más importantes de la variabilidad meteorológica y de la calidad de aire, tanto en la zona central del país como en el área urbana de Santiago.
- Ajustar las opciones físicas del modelo para lograr resultados simulados de variables meteorológicas lo más cercano posibles a las observaciones disponibles en la zona central de Chile.
- Realizar una evaluación de los resultados modelados para variables meteorológicas como la temperatura, humedad y viento; y una caracterización de la altura de capa de mezcla en base a los resultados modelados.
- Describir las características medias del comportamiento espacial de las razones de mezcla de CO en la cuenca de Santiago, usando el modelo CCATT-BRAMS.
- Evaluar la habilidad del modelo para simular el comportamiento temporal de las razones de mezcla de CO, usando las observaciones disponibles.
- Estudiar el potencial de formación de O₃ en el modelo, en función de las magnitudes de sus precursores presentes en el inventario de emisiones.

- Describir las características medias del comportamiento espacial de las razones de mezcla de O_3 en la cuenca de Santiago, usando el modelo CCATT-BRAMS.
- En base a la implementación del modelo, llevada a cabo para Chile, evaluar su habilidad para simular el comportamiento temporal de las razones de mezcla de O_3 , usando las observaciones disponibles.

1.4 Descripción de modelo CCATT-BRAMS

CCATT-BRAMS es un modelo químico y de transporte acoplado, consistente con la dinámica atmosférica (Freitas *et al*, 2005 y 2009). El pronóstico de transporte y de concentración de gases y aerosoles considera procesos de advección, procesos de turbulencia en escala de subgrilla en la capa límite planetaria, transporte convectivo por convección húmeda-profunda y somera, deposición seca y húmeda, además de procesos de ascenso de pluma asociado a quemas de biomasa. Adicionalmente, cuenta con una parametrización de radiación, que toma en cuenta la interacción entre los aerosoles y la radiación de onda larga y corta, llamada CARMA (Toon *et al*, 1998). La figura 1 resume gráficamente el esquema de la física que incluye el modelo. La versión más actualizada del mismo incluye además una química gaseosa, basada en un pre-procesador, para un número de especies químicas y reacciones (Freitas *et al*, 2009, Longo *et al*, 2010).

El sistema de modelamiento ha sido desarrollado continuamente en INPE, donde ha sido usado tanto operacionalmente como para estudios científicos en Sudamérica desde el año 2003 (Andreae *et al*, 2004, Marecal *et al*, 2006, Longo *et al* 2006, Freitas *et al* 2009, Longo *et al*, 2010). Las escalas horizontales en las cuales el modelo es operado actualmente son del orden de las decenas de kilómetros, esto debido a que en CPTEC ha sido principalmente usado para estudiar las quemas de biomasa en el Amazonas y su impacto en la calidad del aire a una escala continental y hemisférica. El pronóstico operativo hecho por CCATT-BRAMS en CPTEC puede consultarse en <http://meioambiente.cptec.inpe.br/>

En este trabajo de tesis, se realizarán simulaciones en una escala más local, lo cual implicará reducir el espaciamiento horizontal de los puntos de grilla respecto a lo hecho anteriormente en Brasil.

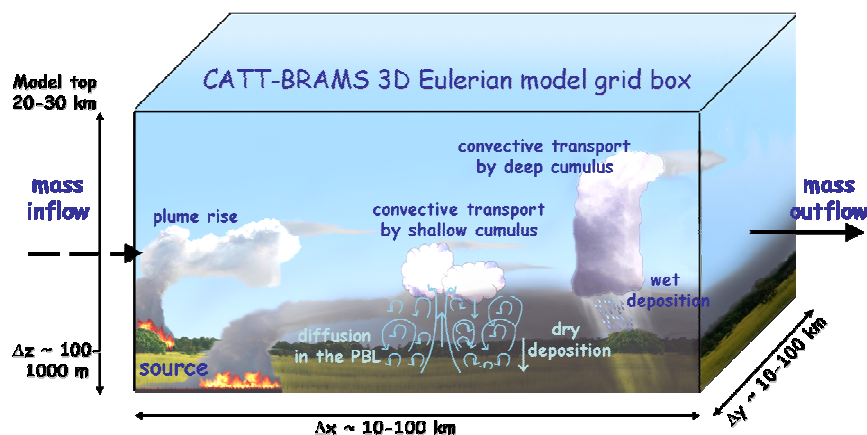


Figura 1. Esquema de la física que incluye del modelo CATT-BRAMS (diagrama extraído desde Freitas).

El módulo meteorológico del modelo BRAMS, está basado en el modelo RAMS (Regional Atmospheric Modeling System), el cual es un modelo no hidrostático (Tripoli and Cotton, 1982), diseñado para simular circulaciones atmosféricas en diferentes escalas. El modelo tiene disponible un conjunto de programas para simular procesos tales como transferencia radiativa, transporte turbulento en la capa límite planetaria, microfísica de nubes, parametrización de cúmulos para convección profunda y somera, así como un sub-modelo para calcular el almacenamiento e intercambio vertical de agua y energía entre la superficie y la atmósfera, llamado LEAF-2 (Land Ecosystem Atmosphere Feedback model, Walko *et al*, 2000). En Brasil, se hicieron desarrollos a la versión original del modelo RAMS, incluyendo parametrizaciones y modificaciones que se adecuan mejor a regiones tropicales, tales como una nueva opción de parametrización de cúmulos (Grell and Devenyi, 2002), dos nuevos esquemas de turbulencia, mejoras en la estimación de humedad del suelo para la inicialización del modelo así como en el código del modelo. Esta versión mejorada del modelo es la conocida como BRAMS (Brazilian RAMS).

Con respecto al módulo químico del modelo, CCATT es un modelo euleriano de transporte, acoplado con la dinámica atmosférica, el cual resuelve la ecuación de conservación de la masa considerando procesos advectivos, turbulentos, de convección, deposición húmeda y seca, fuentes y reacciones químicas (Freitas *et al*, 2009), como se muestra en la ecuación 1. Dicha ecuación muestra esquemáticamente que la variación en el tiempo de la masa de una traza está gobernada por la variación de la misma debida a procesos advectivos (transporte), turbulentos, convectivos, de deposición, a las reacciones químicas asociadas a su formación o destrucción y al comportamiento de las fuentes y sumideros de la traza.

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \left[\frac{\partial s}{\partial t} \right]_{adv} + \left[\frac{\partial s}{\partial t} \right]_{turPBL} + \left[\frac{\partial s}{\partial t} \right]_{conv} + \left[\frac{\partial s}{\partial t} \right]_{dep} + \left[\frac{\partial s}{\partial t} \right]_{reacc. quim.} + \text{Fuentes} + \text{Sumideros} \quad (1)$$

1.4.1 Listado y descripción breve de las parametrizaciones del modelo

La tabla 1 muestra un resumen de las parametrizaciones disponibles en el modelo, donde es indicado en **negrita** las que fueron elegidas en las simulaciones hechas para este trabajo.

Tabla 1. Resumen de parametrizaciones disponibles en CCATT-BRAMS.

| | |
|--|--|
| 1. Esquema de topografía | <ul style="list-style-type: none"> - Orografía promedio - Orografía silueta - Orografía envoltura - Orografía envoltura reflejada |
| 2. Humedad de suelo | <ul style="list-style-type: none"> - Homogénea - Heterogénea |
| 3. Parametrización de coeficiente de difusión turbulenta | <ul style="list-style-type: none"> - Deformación en la horizontal /Mellor-Yamada en vertical - Deformación anisotrópica (espaciado horizontal y vertical diferentes) - Deformación isotrópica (espaciado horizontal y vertical similar) - Deardorff TKE (espaciado horizontal y vertical similar) |
| 4. Esquema de rugosidad superficial | <ul style="list-style-type: none"> - Basado en vegetación, suelo yermo y superficies de agua - Basado, además, en la topografía de sub-grilla |
| 5. Parámetros de radiación | <ul style="list-style-type: none"> - Ninguno - Mahrer/Pielke - Chen - CARMA |
| 6. Parametrización de cúmulos | <ul style="list-style-type: none"> - Ensamble - Grell - Omega de bajo nivel - Convergencia de humedad - Fritsh Chappel o Kain Fritsch |
| 7. Parametrización de capa superficial | <ul style="list-style-type: none"> - Gradientes de capa superficial - Modelo de suelo/vegetación |
| 8. Microfísica | <ul style="list-style-type: none"> - Diagnóstico de concentración - Diámetro medio específico - Intercepto-y específico - Concentración específica - Prognosis de concentración |

La elección de las parametrizaciones físicas, utilizadas en las corridas realizadas para este trabajo, fue básicamente replicada de la configuración operativa de CCATT-BRAMS en CPTEC, lo cual fue hecho en particular para las parametrizaciones 4, 5, 6, 7 y 8, según la numeración de

la tabla 1. Para el resto de las parametrizaciones fueron realizadas pruebas de sensibilidad, para en base a estos experimentos elegir el esquema más adecuado.

Dado que las simulaciones a realizar en este trabajo se orientan principalmente a estudiar condiciones de calidad del aire, las sensibilidades realizadas (capítulo 2) apuntaron a optimizar las variables meteorológicas relacionadas con este objetivo. Por dicho motivo se hizo un análisis selectivo de las parametrizaciones que más podrían influir, por ejemplo, sobre la capa límite y las condiciones superficiales de humedad, temperatura y viento. Por este motivo, no se consideró hacer sensibilidad de esquemas de microfísica ni de parametrización de cúmulos, dado que en el verano austral sobre Santiago predominan condiciones secas y con escasa formación de nubosidad. En los casos de las parametrizaciones de rugosidad superficial, radiación y capa superficial, fueron elegidas las opciones más avanzadas disponibles en el modelo.

Por lo tanto, en función de este criterio se decidió hacer pruebas de sensibilidad con los esquemas de turbulencia, orografía y humedad de suelo. A este respecto, en la sección 1.5.2 se hará una descripción detallada de éstas parametrizaciones. Finalmente, a continuación se describirán brevemente las parametrizaciones elegidas, pero sobre las que no se harán sensibilidades (tabla 2).

Tabla 2. Resumen y descripción de parametrizaciones elegidas en CCATT-BRAMS, sobre las que no se harán sensibilidades.

| Parametrización | Descripción de parametrización elegida |
|---|---|
| Esquema de Rugosidad Superficial | Basado en tipo de vegetación, textura de suelo y superficies de agua. Además fue activada la opción para considerar la rugosidad proveniente de la topografía de sub-grilla. |
| Parámetros de Radiación | CARMA “Community Aerosol & Radiation Model for Atmospheres” – NASA. Parametrización que considera las transferencias radiativas y simulación de los procesos de microfísica asociados con aerosoles atmosféricos, según lo descrito en Toon <i>et al</i> , 1988. |
| Parametrización de Cúmulos | Cúmulos someros y convección profunda, basados en un esquema de flujo de masa con varios cierres, basado en Grell <i>et al</i> , 2002. |
| Parametrización de suelo y capa superficial | Basado en el modelo suelo/vegetación LEAF, el cual es un sub-modelo en CCATT-BRAMS que simula los intercambios de agua suelo-atmósfera, de momentum y energía, representando el almacenamiento e intercambio vertical de agua y energía en múltiples niveles, incluyendo efectos de congelamiento y deshielo en el suelo, cobertura temporal de agua o nieve, efectos de la vegetación y canopia según Walko <i>et al</i> , 2000. |
| Parametrización de Microfísica | Denominada de nivel 3, basada en Walko <i>et al</i> , 2000. |

1.4.2 Descripción de las parametrizaciones elegidas para estudio de sensibilidad

Se hará una descripción más profunda de las parametrizaciones sobre la cuales se harán pruebas de sensibilidad, siendo éstas orografía, turbulencia y humedad de suelo. Es importante que estas opciones físicas estén ajustadas en el modelo de modo tal de simular, en la forma más cercana a lo observado, variables meteorológicas influyentes sobre las condiciones de dispersión de los contaminantes, tales como el viento, los flujos radiativos superficiales de onda larga (calor sensible y latente) y la capa límite atmosférica.

1.4.2.1 Parametrizaciones de orografía

CCATT-BRAMS cuenta con diversas opciones para ajustar los datos iniciales de topografía a la resolución escogida en la simulación.

Una de ellas es la llamada *average orography*, que es un promedio de las alturas que están entorno al punto de grilla, conservando el volumen total de topografía sobre el nivel del mar, lo cual produce una topografía más bien suave que reduce el efecto de barrera de la misma sobre el aire (RAMS topography document). Dicha opción es la que es utilizada en la configuración operativa de CCATT-BRAMS en CPTEC, Brasil.

La segunda opción disponible para el tratamiento de la topografía es la llamada *silhouette averaging*, la cual ha sido la opción más frecuentemente elegida por los modeladores en RAMS (Gohm, 2005), modelo base de BRAMS. Este método elige la mayor altura de un área de grilla, la cual se considera como la altura representativa del respectivo punto de grilla, según lo desarrollado por Mesinger *et al* (1988) que, a diferencia del caso anterior, no conserva el volumen total del terreno, por el contrario se agrega mayor masa (volumen de topografía), pero manteniendo la altura del efecto de barrera orográfica que debe enfrentar el viento al cruzar una montaña.

Otra opción disponible para parametrización de topografía es la llamada *envelope*, la cual propone representar el efecto de bloqueo de la topografía de sub-grilla incrementando la altura de las montañas, respecto al promedio, en un factor de una vez la desviación estándar de las alturas de sub-grilla, lo cual fue desarrollado en Wallace *et al*, 1983. Este método también produce un mayor volumen de topografía que la observada, con el fin de mantener el efecto de bloqueo montañoso.

Finalmente se dispone de una parametrización llamada *reflected envelope*, la cual preserva el efecto de barrera de la topografía además de la profundidad de los valles (no los llena), siendo la parametrización que produce la topografía más abrupta (Liang *et al*, 2005).

1.4.2.2 Opciones de humedad de suelo inicial

En los experimentos realizados con CCATT-BRAMS, para este trabajo, se utiliza la opción de humedad inicial de suelo llamada homogénea, la cual es controlada por un parámetro llamado SLMSTR, que varía entre 0 y 1. Cabe mencionar también que existe otra opción de humedad de suelo en el modelo llamada heterogénea, descrita en Gevaerd y Freitas (2006), llevada a

cabo a través de estimaciones diarias con datos satelitales de precipitación, que son aplicados en un modelo hidrológico; con lo que finalmente se generan campos diarios de humedad de suelo de 8 capas que son considerados como condición de borde en las simulaciones de CCATT-BRAMS. Sin embargo, para la zona central de Chile no se generan estos datos interactivos de humedad de suelo, por lo tanto se trabajó con la opción llamada homogénea.

La humedad inicial de suelo, en la opción homogénea, puede ser modificada en el archivo de configuración y control de una simulación en BRAMS y representa el factor de ponderación aplicable al contenido de humedad de saturación que posea cada tipo de suelo, según la información de uso de suelo del Servicio Geológico de Estados Unidos (USGS) de 1 km de resolución, que es ingresada al modelo como condición de borde. En otras palabras, es el factor por el cual se multiplicará el contenido de humedad de saturación del suelo, η_s (volumen de agua por volumen de suelo), siendo este resultado el valor de humedad de suelo inicial de la corrida, para cada área de grilla. Por ejemplo, para un suelo arenoso con un η_s de 0.4 (Garratt, 1992), si se define un factor de humedad inicial de 0.5, implicará que el área de grilla de suelo que posea esas características tendrá una η inicial de 0.2.

1.4.2.3 Parametrizaciones de turbulencia

Forma general

El modelo parametriza flujos turbulentos usando la teoría K, en la cual las covarianzas son evaluadas como el producto del coeficiente de mezcla turbulenta K y el gradiente de la variable a transportar. Los detalles de las parametrizaciones fueron obtenidos del documento técnico disponible del modelo (RAMS Technical description).

Para escalares, la parametrización toma la forma según la ecuación 2:

$$\overline{u_i' \phi'} = -K_{hi} \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_i} \quad (2)$$

Donde i es la dirección $i=[1,2,3]$, K_{hi} es el coeficiente de mezcla turbulenta para variables escalares, el cual es definido siempre como positivo, lo cual limita los flujos a ser gradiente-abajo (k siempre es positivo).

Para los flujos turbulentos de momentum, la parametrización puede tener dos formas, dependiendo de las escalas de movimiento resueltas en la grilla del modelo, o sea la relación de tamaños entre el espaciamiento de grilla horizontal y vertical.

Distancia de grilla horizontal y vertical similar

Cuando el espaciamento de grilla horizontal es comparable en magnitud al vertical, los términos turbulentos de Reynolds son evaluados con la expresión de la ecuación 3:

$$\overline{u_i' u_j'} = -K_{mi} \left[\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right] \quad (3)$$

Donde se aplica para la dirección $i=[1,2,3]$ y $j=[1,2,3]$, siendo K_{mi} el coeficiente de mezcla turbulenta para momentum. En este caso, es asumido que $K_{mi} = K_{mj}$, por lo tanto se asume simetría de las componentes del esfuerzo de Reynolds, o sea $\overline{u_i' u_j'} = \overline{u_j' u_i'}$

Distancia de grilla horizontal mucho mayor que la vertical

Si el espaciamento horizontal de la grilla es mucho mayor al vertical, no debe mantenerse la simetría del esfuerzo de Reynolds entre la dirección horizontal y vertical. Al imponer en el modelo el forzamiento de una baja resolución horizontal, se debe ajustar adecuadamente el K_{mi} , haciendo mayor éste valor respecto al K en la vertical. Entonces, este K ajustado en la horizontal es realmente más grande en magnitud que cualquier transporte físico producido por flujo turbulento, y es usado sólo como un requerimiento para la estabilidad numérica de la simulación.

Entonces, en estos casos se aplica la ecuación 3 sólo para la estimación de flujos turbulentos en direcciones horizontales ($i=1,2$ y $j=1,2$), y se utiliza la ecuación 4 cuando i y/o j es 3 (dirección vertical):

$$\overline{u_i' u_j'} = -K_{mi} \left[\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \right] \quad (4)$$

Opciones para calcular K_{mi} y K_{hi}

BRAMS presenta cuatro opciones básicas para calcular K_{mi} y K_{hi} .

1. Deformación anisotrópica
2. Deformación isotrópica
3. Deformación horizontal / Mellor – Yamada Vertical
4. TKE Deardorff

Las dos primeras están basadas en esquemas propuestos por Smagorinsky (1963), donde los coeficientes de mezcla turbulenta son relacionados con la tasa de deformación de éste, incluyendo correcciones por la influencia de la frecuencia de Brunt-Väisälä y por el número de Richardson. Estos dos esquemas son de tipo local, debido a que los coeficientes de mezcla turbulenta sólo dependen de las propiedades locales y actuales del fluido. La diferencia entre ambos esquemas es que el de deformación anisotrópica está pensado para simulaciones con baja resolución horizontal respecto a la vertical, mientras que el esquema de deformación isotrópica es para grillas horizontales de dimensiones similares a las verticales.

Las otras dos opciones diagnostican coeficientes de mezcla turbulenta vía estimaciones de sub-grilla de la energía cinética turbulenta (TKE), la cual es pronosticada en el modelo. En este caso, aunque los esquemas en esencia siguen siendo locales y el diagnóstico esté basado en las condiciones locales y puntuales de TKE, tienen elementos de los tipos de cierres no locales, debido a que el TKE puede ser generado en cualquier parte del dominio y ser transportado a otros lugares. La diferencia entre ambos esquemas es que Mellor-Yamada (Mellor y Yamada, 1974 y 1982) está pensado cuando se elige una resolución vertical mucho mayor que las horizontal, mientras que Deardorff (1980) considera dimensiones de grilla horizontales y verticales similares.

1.5 Datos de entrada requeridos en el modelo

A continuación se hará una breve descripción de los datos que requiere el sistema CCATT-BRAMS para realizar las simulaciones, tanto de condiciones iniciales como de borde. Es importante destacar que estos datos de entrada son previamente procesados por los distintos módulos contenidos en CCATT-BRAMS, para dejarlos preparados en un formato adecuado para que puedan ser leídos e ingresados al modelo. Una descripción de este proceso puede ser encontrada en el Anexo 1 de este trabajo.

SST: *Sea Surface Temperature* (Temperatura superficial del mar) climatológica global, con 1° de resolución, promedios para cada semana del año. Los datos son producidos en base a observaciones in situ y satelitales de SST, más SST simulada para sectores marinos con cobertura de hielo. Mayor detalle de los análisis son descritos en Reynolds *et al*, 2002.

Uso de suelo: Datos de uso de suelo global para BRAMS, con 30s resolución o aproximadamente 1 km de resolución. Los datos son provenientes de la base de datos USGS (*United States Geological Service*), los que a su vez están basados en los datos de 1 km del *Advanced Very High Resolution Radiometer* (AVHRR), obtenidos entre abril de 1992 y marzo de 1993.

Topografía: Datos de topografía de USGS de 30s de resolución (~1 km) usados para el dominio fino, y de 10 km de resolución, utilizados para el dominio grueso.

Datos de textura de suelo: Datos globales de textura de suelo, que es una propiedad que describe la proporción relativa de los diferentes tamaños de las partículas que conforman un suelo. Las partículas son agrupadas en función de su tamaño, siendo típicamente llamadas clay (arcilla), silt (limo) y sand (arena). Los datos están cada 2 minutos de resolución, o alrededor de 4 km. y son originados por la Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación, ONU-FAO (FAO, 1995).

NDVI: Los datos están basados en el *normalized difference vegetation index* (NDVI), extraídos del MODIS para los años 2001-2002 y procesados por el *Terrestrial Biophysics and Remote Sensing Lab* (<http://tbrs.arizona.edu/cdrom/Index.html>). La base de datos es mensual con una resolución espacial de 30s.

Reanálisis NCEP (*National Centers for Environmental Prediction*): Archivos de datos que contienen campos meteorológicos para un momento dado. Desde estos archivos se extrajeron las condiciones iniciales y de borde meteorológicas para BRAMS, para las pruebas de sensibilidad realizadas, cuyos resultados son descritos en el capítulo 2 de este trabajo. Una descripción en detalle sobre los reanálisis NCEP puede ser encontrada en Kalnay *et al*, 1996.

Reanálisis CPTEC: Archivos en formato grib, que contienen campos meteorológicos para un momento determinado. Desde estos archivos se extrajeron las condiciones iniciales y de borde meteorológicas para las simulaciones finales hechas con CCATT-BRAMS, cuyos resultados serán descritos en los capítulos 4 y 5 de este trabajo. Estos reanálisis son provenientes de las

salidas del modelo global CPTEC, actualmente corrido con una resolución espectral de T126 (aproximadamente 100 km de resolución horizontal). Una descripción en detalle de estos reanálisis puede encontrarse en Cavalcanti *et al*, 2002 o Marengo *et al*, 2003.

Datos Mozart: MOZART (*Model for Ozone And Related Tracers*) es un modelo global de transporte y químico de la atmósfera, diseñado para simular química troposférica y procesos de transporte, basado en información meteorológica de varios centros meteorológicos mundiales (NCEP, European Centre for Medium-Range Weather Forecasts). MOZART fue desarrollado por NCAR (National Center for Atmospheric Research), el Instituto Max-Planck-Institute y por NOAA/GFDL. MOZART-2 es la versión troposférica que fue publicada por Horowitz *et al*, 2003. Las salidas de este modelo pueden ser usadas como datos de condición inicial química. Por ejemplo, para la simulación meteorológica y de dispersión fue usado un perfil vertical promedio de CO como concentración de “background”, en base a los datos MOZART.

Inventario de emisiones de Santiago: Se consideran en el modelo los datos del inventario oficial de emisiones de Santiago, perteneciente a CONAMA Región Metropolitana (Facilitado por Rainer Schmitz), los cuales constan de una matriz de 40x60 puntos (lat – lon), para múltiples especies. La resolución horizontal del inventario es de 2 km (el tamaño de cada celda es de 2x2 km²) y el factor de emisión respectivo de cada punto está en gramos/(hora x celda). Los datos del inventario están cada 1 hora, desde la hora 0 a la hora 23 local, lo que representa la variación horaria de las emisiones en un día.

Este inventario está dividido en fuentes fijas y móviles, siendo esta última responsable del 95% del total de emisiones de CO (Saide, 2008). El inventario de fuentes móviles se calcula usando la metodología MODEM (Corvalán *et al* 2002) que es del tipo “Bottom-up”, lo que significa que usa información de alta resolución que después es agregada para obtener el inventario final. En este proceso se realizan una serie de simplificaciones, como por ejemplo el uso de una red vial simplificada y la extrapolación de flujos de punta mañana a todo el dominio temporal, que aumentan la incertidumbre del inventario (Saide, 2008). Por ejemplo, en la figura 2 se grafica la distribución espacial de las emisiones de CO, donde los máximos en la figura están ubicados en el área urbana de Santiago, debido al mayor tráfico vehicular; mientras que en la figura 3 se despliega una serie de tiempo que representa la emisión media horaria de CO por fuentes móviles, por unidad de área y tiempo, donde se observan los máximos diurnos de emisión de CO: uno a las 08 de la mañana y otro a las 18 horas local, relacionados con el ciclo del tránsito vehicular en la ciudad. El inventario de emisiones, además de CO, contiene las especies detalladas en la tabla 3.

Tabla 3. Especies contenidas en el inventario local de emisiones de Santiago.

| | | | |
|----------------------------|--------------------------------|--------------------------------|----------------------------------|
| ALD (Aldehídos) | HC3 (Alcanos C3-C5) | KET (Ketones) | OLT (alquinos terminales) |
| CH4 (Metano) | HC5 (Alcanos C6-C8) | NO (Monóxido nitrógeno) | ORA2 (acido acético) |
| HC8 (otros alcanos) | NO2 (Dióxido nitrógeno) | SO2 (Dióxido de azufre) | CSL (cresol) |
| HCHO (Formaldehído) | OL2 (Etileno) | TOL (Tolueno) | ETH (Etano) |
| ISO (isoprenos) | OLI (Alquinos internos) | XYL (Xileno) | |

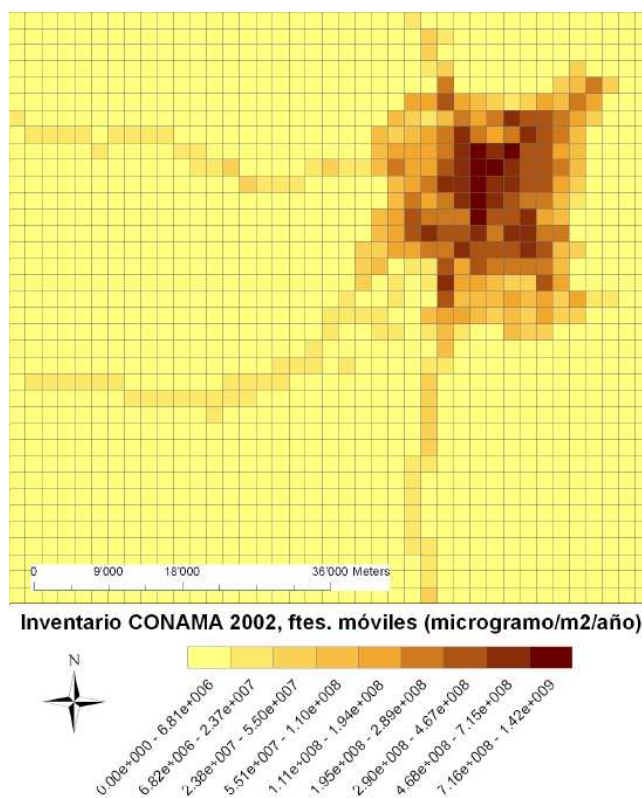


Figura 2. Distribución espacial de emisiones de CO sobre Santiago (Saide, 2008).

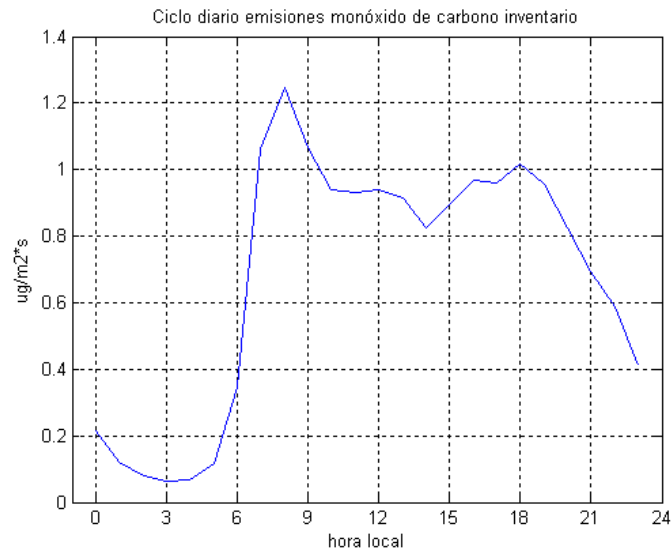


Figura 3. Ciclo diario de emisiones de CO (fuentes móviles) del inventario de emisiones de Santiago.

1.6 Datos para evaluación de resultados del modelo

Para evaluar las salidas del modelo, tanto meteorológicas como de razones de mezcla de CO, O₃ y NO_x, se recopiló información de observaciones provenientes de distintas redes de estaciones de la zona central del país. Respecto a las especies evaluadas, éstas son las que se están disponibles en la red de datos para el periodo en el cual se hicieron las simulaciones, las cuales son detalladas en la tabla 4.

Los datos meteorológicos observados fueron obtenidos de la red administrada por CONAMA RM y el Centro Nacional del Medioambiente (CENMA), de la red de Monitoreo Automático de Calidad del Aire para la región Metropolitana (MACAM), perteneciente a la Autoridad Sanitaria y de la Dirección Meteorológica de Chile (DMC). Todas estas fuentes disponen de su respectiva información en forma horaria. Además, fueron utilizados datos del radiosonda de Santo Domingo, que tienen una frecuencia de lanzamiento de 12 horas (00 y 12 UTC).

Por su parte, los datos de razones de mezcla de CO, NO_x y O₃, generados las estaciones de la red MACAM, están disponibles igualmente en forma horaria.

La tabla 4 y la figura 4 muestran las características de las estaciones utilizadas en la evaluación.

Tabla 4. Estaciones meteorológicas y de calidad de aire, ubicación, altitud y variables disponibles para cada una, utilizadas en el estudio. S/l: Sin información.

| Estación | Ind | Red | Lat. | Lon. | Altitud (m.s.n.m) | Temp. | Hum. Rel. | Vto. | Nubes | CO | O ₃ | NO _x |
|-----------------------|-----|-------|--------|--------|-------------------|-------|-----------|------|-------|----|----------------|-----------------|
| Cerrillos | C | Macam | -33,49 | -70,71 | S/l | | X | | | X | X | X |
| El Bosque | EB | Macam | -33,54 | -70,66 | S/l | | X | | | X | X | |
| La Paz | PZ | Macam | -33,42 | -70,65 | S/l | X | X | | | X | X | |
| La Florida | LF | Macam | -33,51 | -70,59 | S/l | X | X | | | X | X | |
| Las Condes | LC | Macam | -33,37 | -70,52 | S/l | | X | | | X | X | X |
| Pudahuel | P | Macam | -33,43 | -70,75 | S/l | | X | | | X | X | X |
| Parque | Q | Macam | -33,46 | -70,66 | S/l | | X | | | X | X | |
| Entel | E | Cenma | -33,44 | -70,65 | 554 | X | | X | | | | |
| La Platina | PL | Cenma | -33,57 | -70,62 | 652 | X | | X | | | | |
| Cuesta Chada | CH | Cenma | -33,93 | -70,65 | 696 | X | | X | | | | |
| Codigua | CD | Cenma | -33,76 | -71,32 | 131 | X | | X | | | | |
| La Dormida | LD | Cenma | -33,06 | -70,98 | 1413 | X | X | X | | | | |
| Lo Prado | LP | Cenma | -33,46 | -70,93 | 1065 | X | X | X | | | | |
| Mallarauco | M | Cenma | -33,57 | -71,15 | 156 | X | X | X | | | | |
| El Manzano | EM | Cenma | -33,59 | -70,37 | 874 | X | X | X | | | | |
| La Reina | LR | Cenma | -33,45 | -70,52 | 680 | X | X | X | | | | |
| El Paico | EP | Cenma | -33,70 | -71,00 | 255 | X | X | X | | | | |
| Pudahuel - aeropuerto | PA | DMC | -33,38 | -70,78 | 476 | X | X | X | X | | | |

El periodo en el cual la evaluación de resultados del modelo es realizada, tanto de variables meteorológicas como de calidad de aire, comprende entre el 02 de enero a las 00Z y el 14 de enero a las 23Z.

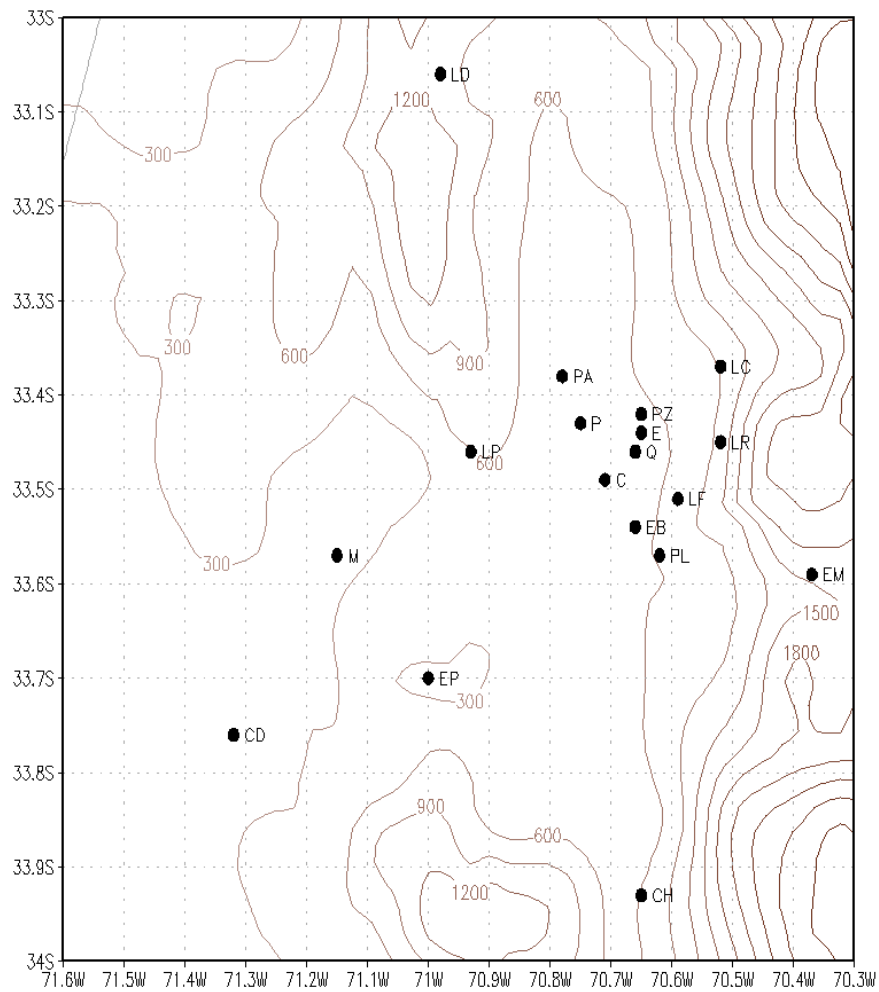


Figura 4. Estaciones meteorológicas utilizadas en el estudio para la evaluación del modelo. Los indicadores que representan las estaciones son mencionados en la Tabla 4.

1.7 Estudios previos sobre el comportamiento de las observaciones de calidad del aire en Santiago

Se considera pertinente revisar los antecedentes disponibles en función de describir el comportamiento del CO, O₃ y sus precursores, en base a estudios previos realizados para la cuenca de Santiago. Las observaciones en las cuales se han basado los mismos provienen principalmente de la red MACAM, descrita en la sección anterior, y de campañas de medición de hidrocarburos, las cuales han sido realizadas sólo en forma esporádica y acotada en el tiempo, lo cual da cuenta de la limitación existente en el registro de este tipo de compuestos a través de observaciones continuas y específicas.

1.7.1 Descripción breve del origen, estacionalidad y ciclos diarios del CO, O₃ y NO_x

El monóxido de carbono es una traza que tiene origen principalmente en fuentes móviles (CONAMA, 2004), aunque también es producida por la oxidación del metano, alcanos y compuestos orgánicos volátiles (Gallardo, 2006). El ciclo diario presente en las concentraciones de CO está relacionado con los máximos diarios de las emisiones de la traza y la variación diurna de las condiciones de ventilación presentes. Por ello, las máximas concentraciones tienden a observarse en la madrugada, cerca del máximo diurno de emisión (figura 3) donde además se presentan condiciones de estabilidad atmosférica, que limitan el volumen de dispersión de contaminantes. Respecto al ciclo anual, se observan mayores concentraciones de CO en otoño e invierno, dado el aumento de estabilidad atmosférica presente en la cuenca, además de presentarse episodios meteorológicos asociados a remarcada reducción de la ventilación (Garreaud, 2002).

El ozono, por su parte, es un contaminante secundario producido por la oxidación del monóxido de nitrógeno a dióxido de nitrógeno, el cual a su vez por procesos de fotólisis produce ozono (Gallardo, 2006). Este tipo de procesos explica que el ciclo diario de la traza presente un máximo entorno a la hora de máxima radiación solar, mientras que su producción decrece cuando disminuye la radiación en su ciclo diario. Esta dependencia de la formación de ozono con la radiación también condiciona el ciclo anual de la traza, ya que se presentan los valores más altos en primavera-verano, disminuyendo éstos en otoño-invierno.

Los óxidos de nitrógeno en los centros urbanos son producidos mayormente por la oxidación del nitrógeno atmosférico en combustión a altas temperaturas (Gallardo, 2006). El estado inicial de los NO_x es el NO, el cual es producido principalmente por fuentes móviles (Schmitz, 2007), tiene un ciclo diario similar al CO y su oxidación produce NO₂.

1.7.2 Estudios sobre las observaciones de ozono, sus precursores y otras especies

En Gramsch *et al*, 2006, se estudian los datos de O₃ y material particulado de hasta 10µm de diámetro (PM10), en orden a determinar las tendencias estacionales y distribución espacial de los contaminantes, en base a datos del año 2000. Los resultados del trabajo muestran una marcada dependencia de los niveles de concentración con la estación del año, siendo el PM10 alto en invierno y el O₃ en verano respectivamente. En particular para el O₃, el análisis de

clúster de los datos indica que el contaminante generado sobre la ciudad es distribuido sobre cuatro grandes áreas siendo una de ellas conformado por las estaciones de Parque, Cerrillos y Pudahuel; la segunda de ellas por La Paz y Providencia, la tercera por La Florida y El Bosque y la cuarta únicamente por Las Condes. Estos grupos fueron similares a los encontrados para el caso del PM10, lo cual se considera un fuerte indicador que los niveles en las concentraciones son primariamente determinados por las características topográficas y meteorológicas del lugar. Dichos resultados concluyen que en Santiago la reducción de los contaminantes debe estar enfocada sobre la ciudad en forma general, porque los niveles locales de contaminación no están determinados únicamente por las fuentes locales. En general, este estudio muestra la distribución de los contaminantes (ozono y PM10) en las distintas zonas de la ciudad, lo cual se espera replicar en los resultados de las trazas modeladas por CCATT-BRAMS, al menos lo que permita la resolución horizontal a usar en el mismo.

En Rappenglück *et al*, 2005 se describe el resultado de una campaña de mediciones, realizada durante la primavera de 2002, donde se midieron O₃, NO_x, CO y COV en 3 sitios de la cuenca de Santiago (El Monte-rural, Las Condes-suburbana y Parque-urbano), que representan condiciones flujo arriba, flujo abajo y el centro de la ciudad, respecto al viento predominante en el día. La campaña fue hecha durante 3 días seguidos, que tuvieron distintas condiciones fotoquímicas y meteorológicas. El objetivo era estudiar el impacto de los hidrocarburos C2-C9 sobre la formación de contaminantes secundarios. Se encontró que las máximas concentraciones de hidrocarburos primarios ocurren en el centro de la ciudad (Parque O'Higgins), mientras que en las áreas rurales al oeste de la misma se observan valores 10 veces más bajos que en el centro. Algunos hidrocarburos son medidos en altas concentraciones como los alcanos propano, n-butano e i-pentano, especies típicamente encontradas en el gas licuado de petróleo LPG (Blake and Rowland, 1995), así mismo se han reportado altas concentraciones de propano, en coincidencia con altos valores de i-butano y n-butano entre las 05 y 09 horas local, indicando que tienen la misma fuente, o sea los LPG (Chen *et al*, 2001). Respecto nuevamente a los LPG, se observó un cambio en la distribución espacial entre 1996 y 2002, ya que se produjo una reducción considerable de los LPG (no debidos al tráfico) en la zona oriente de la ciudad, que fue explicada por la conversión de LPG a gas natural experimentada en dicha zona. Por otro lado para los compuestos aromáticos, que son primariamente emitidos por el tráfico (tubos de escape y evaporación de gasolina), fueron encontrados en el estudio los más altos valores entre 2 ppbv (Las Condes) y 4 ppbv (Parque) para benceno y entre 6 ppbv (Las Condes) y 13 ppbv (Las Condes) para tolueno. En general se espera que los mínimos de concentraciones de hidrocarburos no metánicos se produzcan durante el día, debido al fortalecimiento de los procesos turbulentos, las transformaciones

químicas y al máximo que alcanza la capa de mezcla. Respecto a los isoprenos, fueron encontrados altos valores en la estación Parque debido a la vegetación presente en esa zona, los cuales fueron mayores que los encontrados tanto viento arriba (El Monte, rural) como viento abajo (Las Condes) respecto al centro de la ciudad. En cuanto a las mediciones de carbonilos, el 70% de ellos está conformado por el formaldehído, acetaldehído y acetonas, tanto en la zona urbana (Las Condes y Parque) como en las rurales (El Monte), encontrándose los más altos valores en Las Condes. Los resultados de las mediciones mostraron que los alcanos representan la mayor fracción de COV, seguido por los aromáticos y alquenos, siendo las menores los alquinos e isoprenos. Respecto a la reactividad, en la mañana los alquenos fueron los más importantes, a mediodía son los aromáticos y en la tarde son los isoprenos, estos últimos contribuyen a formar un segundo máximo (hombro) en el área suburbana de Las Condes. Los alcanos no contribuyeron con más del 20% del total de la reactividad de una masa de aire, a pesar de presentar las razones de mezcla más altas. La generación de O₃ sobre 50 ppbv es atribuida principalmente a hidrocarburos relacionados a factores antrópicos (tráfico vehicular). Respecto a la formación de aerosoles orgánicos secundarios, las emisiones de tráfico proveen los principales contribuyentes, básicamente aromáticos. En resumen, el estudio muestra la importancia de considerar una adecuada especiación de los hidrocarburos, en función de representar su reactividad durante distintos periodos del día. Sin embargo, el inventario local de emisiones a usar en CCATT-BRAMS carece de una adecuada caracterización de los mismos, lo que podría afectar el desempeño en el modelo de los mecanismos químicos usados para las simulaciones.

En Elshorbany *et al*, 2009, se lleva a cabo una campaña de medición, la cual es comparada con los resultados de un modelo fotoquímico basado en el mecanismo químico maestro (MCMv3.1). Los análisis realizados muestran que la formación de ozono es COV limitada, en condiciones estivales sobre Santiago. También se encontró que la tasa máxima de producción modelada de O₃ fue de 160 ppbv/h entorno a las 15 horas. Por su parte, se encontró que el alto potencial para la formación de O₃ vía isoprenos y α -pineno sugiere que otro tipo de emisiones biogénicas también podría tener un significativo impacto sobre la fotoquímica en verano sobre Santiago. En cuánto al comportamiento diario del O₃, en la mañana éste es dominado principalmente por la oxidación del propano (alcano), mientras que a mediodía se encontró que la mayor contribución fue dada principalmente por el 1,3,5-trimetilbenceno y tolueno (aromáticos), finalmente en la tarde la foto-oxidación de especies biogénicas como isoprenos y α -pineno podrían contribuir al "hombro" de O₃ observado. Sin embargo, este efecto no fue simulado por el modelo, lo cual sugiere que otros factores podrían jugar un rol importante en su formación, como por ejemplo el ácido nitroso (HONO), lo cual motiva la necesidad de incluir

este compuesto en los modelos de predicción fotoquímico. En resumen este estudio, al igual que en Rappenglück *et al* (2005), muestra la importancia de una adecuada especiación de los hidrocarburos; además, destaca la importancia de las especies biogénicas en la fotoquímica estival durante la tarde. Sin embargo, estas especies no son consideradas en el inventario oficial de emisiones usado en las simulaciones con CCATT-BRAMS, asunto a tener en consideración al momento de evaluar los resultados obtenidos en este trabajo.

Estos estudios determinan en general, con las observaciones de las estaciones y los resultados de las campañas de medición realizadas, los patrones espaciales encontrados para el O₃, los cuales han sido reproducidos por otros experimentos (Alcafuz, 2008 y 2009 y Schmitz, 2007) y se esperan reproducir con CCATT-BRAMS. Por otro lado, queda en evidencia la importancia de contar con un inventario de emisiones que caracterice, tanto la variedad como la cantidad adecuada de los COV presentes sobre Santiago, además por supuesto de los óxidos nitrosos. Respecto a este punto, en este trabajo se hará una descripción de las razones entre COV y NO_x, con el objeto de tener una idea previa de los potenciales de ozono a obtener en las simulaciones a realizar. En este aspecto, en el marco del proyecto SAEMC se está realizando una evaluación de NO_x y CO que sugiere que, efectivamente, los primeros están sobreestimados en un factor de 2 a 3 (comunicación personal, Laura Gallardo).

1.8 Estudios previos en base a modelación numérica de la calidad del aire en Santiago

En el marco de la problemática de la calidad del aire, la aplicación de diversos modelos numéricos, así como gaussianos, estadísticos u otros, sobre la ciudad de Santiago han buscado comprender y predecir el comportamiento de las trazas atmosféricas en la cuenca. La forma de dar respuestas a la variabilidad presente en los datos y observaciones ha sido a través de modelos, los cuales básicamente representan una hipótesis que intenta describir cómo funciona cierto sistema, para explicar o reproducir lo que se observa (Gallardo, 2006).

En términos generales, un modelo numérico tipo euleriano, como CCATT-BRAMS, supone un volumen fijo en el espacio y está basado en la ecuación de la conservación de la masa (Seinfeld and Pandis, 1998); por lo tanto considera procesos de transporte, difusión, divergencia, fuentes, sumideros, además de condiciones iniciales y de borde, siendo los 3 primeros procesos descritos proveídos por un modelo meteorológico. El objetivo principal de estos modelos es saber cómo cambia la traza atmosférica en el tiempo y en el espacio.

La forma cómo integrar los procesos meteorológicos con los propios relacionados con la dispersión y química da origen a 2 tipos de modelos: los modelos no acoplados (*off-line*) y los acoplados (*on-line*). En Grell *et al*, 2004; se describe que en un modelo no acoplado los procesos químicos y de transporte son integrados usando las salidas de un modelo meteorológico, lo cual trae como consecuencias la imposibilidad de una retroalimentación entre los procesos químicos y los meteorológicos, aunque trae ventajas operativas tales como ahorro en el tiempo de cómputo necesario. Por otro lado, en los modelos acoplados los procesos químicos son integrados simultáneamente con los procesos meteorológicos, permitiendo una retroalimentación entre ambos, como por ejemplo, en el efecto de la absorción y dispersión de radiación atmosférica por parte de los aerosoles y cómo dicha radiación podría afectar los procesos de formación de nubes.

Físicamente los modelos acoplados son una mejor respuesta que los no acoplados, dada que una atmósfera urbana comprende en la realidad múltiples interacciones entre sus componentes (Grell *et al*, 2004). Sin embargo, en la escala temporal de un pronóstico del tiempo, es aún tema de discusión la ventaja que pudieran ofrecer los modelos acoplados respecto de los no acoplados, respecto a sus resultados.

Varios autores han abordado el problema de simular la calidad del aire en la cuenca de Santiago y sus alrededores, tales como Gallardo *et al* 2000, Gallardo *et al* 2002, Schmitz 2005, Schmitz *et al*, 2007, Saide, 2008, Alcañuz *et al*, 2008, Jorquera y Castro, 2009, entre otros. En esta sección se revisarán dichos antecedentes y se hará una descripción general de algunos de estos trabajos, con el objeto de tener un marco de referencia en función de estos estudios previos, para en ese contexto comparar los resultados obtenidos en este trabajo.

1.8.1 Modelamiento de CO

En Gallardo *et al*, (2000) se realizaron simulaciones de CO para el mes de Enero del año 1998, usando el inventario oficial de emisiones de fuentes móviles de alta resolución espacial (1x1 km²), considerando al CO una traza pasiva sólo sometida a transporte y mezcla y con una resolución temporal de 1 hora, que diferenciaba entre días de semana y fines de semana. El modelo usado fue HIRLAM-MATCH. HIRLAM es un modelo meteorológico de área limitada, que fue aplicado con una resolución horizontal de 10x10 km². El modelo de dispersión usado fue MATCH, de área limitada, no acoplado y euleriano. La grilla horizontal usada para MATCH es

de 5x5 km² y 15 niveles en la vertical hasta una altura de 5 km y las razones de mezcla fueron guardadas cada 3 horas. Las condiciones de borde son consideradas como aire limpio. Los resultados para CO mostraron que el modelo fue capaz de reproducir el ciclo diario, con las mayores razones de mezcla en horas de la mañana (7-8 horas local) y con otro máximo menos pronunciado en la tarde, siendo los valores diurnos mejor estimados que los nocturnos, éstos últimos subestimados por el modelo.

Por su parte, Schmitz (2005), hizo una simulación de CO para el mes de Enero del año 2002. Los campos meteorológicos usados fueron resultados del modelo meteorológico MM5 (Grell *et al*, 1994) y las emisiones consideradas para la simulación correspondieron al inventario oficial CONAMA 2002 siendo los resultados del modelamiento validados con datos de CO de la red de monitoreo oficial de Santiago. El modelo de transporte utilizado es el Modelo de Dispersión de Contaminantes Atmosféricos Chileno, que es un modelo de transporte, fotoquímico, no acoplado y euleriano en 3 dimensiones, aplicado alrededor del área donde se ubica la Región Metropolitana de Chile. Para el caso de CO sólo se ocupa el modulo de transporte (sin química) y la deposición seca o húmeda tampoco es considerada. Las simulaciones se realizan con una resolución espacial de 2x2 km² y 30 niveles verticales (los niveles del modelo meteorológico) y una resolución temporal de 1 hora. Las condiciones de borde son consideradas como aire limpio. Los resultados mostraron una adecuada representación del viento a lo largo del día, mientras que las razones de mezcla de CO también mostraron buenos resultados (en cuanto a correlación, error cuadrático medio y desviación estándar), excepto en las estaciones de Santiago (Parque) y Cerrillos, donde el modelo sobrestimó las medias diarias. En Pudahuel se obtuvieron los mejores resultados, mientras que para Las Condes la representación del ciclo diario presentó un bajo acierto. La ubicación de las estaciones mencionadas puede observarse en la figura 4.

Por otro lado, en Saide (2008) aplicaron el modelo Polyphemus (Mallet *et al*, 2007) para simulaciones de CO, trabajo que apuntó principalmente al mejoramiento del inventario de emisiones a través de modelamiento inverso. Polyphemus es un sistema de modelación de la calidad de aire de código abierto desarrollado por ENPC-CEREA (*Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique*) e INRIA (*Institut National de Recherche en Informatique et Automatique*). Contiene numerosos modelos de dispersión para distintos tipos de escalas, varios tipos de contaminantes, permite procesar varios tipos de parámetros de entrada y posee metodologías avanzadas para asimilación de datos, ensamble de pronósticos, acoplamiento de modelos, entre otros. Es un modelo de tipo no acoplado, usándose en este caso salidas meteorológicas del modelo MM5.

En cuanto a los resultados obtenidos, para enero del año 2002, el modelo representó de buena forma el ciclo diario en la mayoría de las estaciones; aunque en las magnitudes medias de dicho ciclo se observó una subestimación en La Florida y Las Condes, una sobrestimación en Parque O'Higgins, Independencia y Cerrillos, mientras que en Pudahuel y El Bosque el modelo presentó valores muy similares a las observaciones. Al igual que en Gallardo *et al* 2000, el modelo subestimó las razones de mezcla nocturnas.

Tabla 5. Resumen de las características más relevantes de los modelos utilizados para estudios previos del CO sobre Santiago.

| | Hirlam-Match | Cadm-MM5 | Polyphemus-MM5 |
|--|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| Tipo de modelo | No acoplado | No acoplado | No acoplado |
| Resolución horizontal | 10 (km) | 2 (km) | 2 (km) |
| Emisiones | Inventario oficial CONAMA | Inventario oficial CONAMA | Inventario oficial CONAMA |
| Modelación inversa | No | No | Si |
| Estudio de sensibilidad de opciones meteorológicas | No | No | No |

En resumen, los trabajos previos han mostrado que la circulación estival de la cuenca de Santiago es mejor representada en condiciones diurnas que nocturnas, lo cual ha repercutido en la habilidad de los modelos en representar el comportamiento del CO tanto en el día como en la noche. Las discrepancias en la simulación de CO en la noche, respecto a la observación, podrían deberse a dificultades en la simulación de la capa límite atmosférica en los modelos, aspecto que pretende ser estudiado en este trabajo con mayor detalle. Por otro lado, los patrones espaciales del comportamiento del CO en la cuenca, tanto horizontal como verticalmente, han sido documentados en los trabajos revisados y se espera poder reproducirlos en las simulaciones con CCATT-BRAMS. Según la descripción hecha previamente y la información de la tabla 5, se observa que los trabajos previos han logrado resultados a *grosso modo* similares entre sí, a pesar de las diferencias entre los modelos y las resoluciones espaciales utilizadas. En el presente trabajo con CCATT-BRAMS se estima conveniente dar un mayor énfasis al comportamiento meteorológico del modelo y su impacto sobre la dispersión del CO, tanto a través de estudios de sensibilidad de algunas opciones físicas del modelo como en una evaluación detallada de la simulación meteorológica, lo cual no ha sido el foco de interés en trabajos previos.

1.8.2 Modelamiento de O₃ y precursores

El año 2006, en el Departamento de Geofísica de la Universidad de Chile, se aplica el modelo *Weather Research and Forecasting Model with Chemistry* (WRF-CHEM), para la simulación de O₃ en la cuenca de Santiago (Schmitz y Falvey, 2007). WRF-CHEM es un modelo acoplado, mantenido por el *National Center for Atmospheric Research* (NCAR), el cual provee diversas opciones de parametrizaciones físicas que representan procesos como interacción suelo – atmósfera, radiación solar, física de nubes y precipitación, considerando además, en cuanto a química se refiere, deposición seca, emisiones biogénicas, un complejo esquema de fotólisis y un módulo estado del arte para los aerosoles (Grell *et al*, 2005). Fue corrido con 3 dominios (27, 9 y 3 km) y 25 niveles verticales (llegando hasta 18000 m). En primera instancia, los resultados del modelo mostraron una subestimación en las razones de mezcla de O₃ en todas las estaciones, lo cual fue atribuido a la baja razón entre la cantidad de compuestos orgánicos volátiles (COV) y óxidos de nitrógeno (NO_x) del inventario original, que son precursores del O₃. En una segunda etapa fueron intervenidos los COV y NO_x del inventario original, para aumentar la razón entre estos precursores, con lo cual nuevamente fueron realizadas simulaciones, las que presentaron mejores resultados en O₃ para todas las estaciones comparadas.

Dentro del marco del proyecto SAEMC, la Dirección Meteorológica de Chile ha implementado un sistema operacional para el pronóstico químico sobre Chile central (Alcafuz *et al*, 2008). La implementación consideró la plataforma química Polyphemus acoplada con las salidas del sistema de modelamiento MM5 (Grell *et al*, 1994). El modelo MM5 fue alimentado con reanálisis NOAA-NCEP (Kalnay *et al*, 1996), mientras que la plataforma Polyphemus tomó las condiciones de borde e iniciales de datos del modelo MOZART (Horowitz *et al*, 2003) y del inventario de emisiones de Santiago. En función de obtener magnitudes de O₃ entorno a lo observado, los inventarios locales de emisiones fueron intervenidos, al igual que en Schmitz *et al*, 2007, disminuyendo los NO_x y aumentando los COVs. El mecanismo químico RACM (Stockwell *et al*, 1997) fue elegido en Polyphemus para las simulaciones fotoquímicas. Para una evaluación preliminar de resultados fue hecha una simulación para el mes de diciembre de 2007 sobre Chile central, usando en el dominio de mayor resolución horizontal un espaciado de grilla de 4 kilómetros y 38 niveles verticales. Las evaluaciones meteorológicas indican que en algunas estaciones (La Platina y El Paico) el modelo representa bien el ciclo diario de temperatura, aunque subestima levemente la magnitud. Respecto del viento, el modelo es capaz de representar la brisa diurna, particularmente en las estaciones de El Paico y Codigua, aunque en esta última existen discrepancias en la dirección modelada y observada durante la noche. Por su parte, el ciclo diario promedio de la humedad relativa se simuló levemente subestimado en

las estaciones de El Paico y Codigua. Respecto a la distribución espacial horizontal de O_3 , en la tarde el modelo representa de buena forma las más altas cantidades viento abajo de la cuenca, al este de la ciudad. Los ciclos diarios medios de O_3 en general son bien representados por el modelo, aunque la producción simulada de O_3 cae rápidamente respecto a las observaciones y se representa un segundo máximo nocturno (el máximo principal ocurre después de mediodía) que no es apreciado en los valores medios observados. Respecto a los NO_x , el modelo simula los máximos diurnos entorno a las 09 horas local, tal como es observado, aunque las razones de mezcla de dichas trazas son sobrestimadas por el modelo. Los resultados operacionales del modelo MM5-Polyphemus son actualmente publicados en el sitio web de la Dirección Meteorológica de Chile (www.meteochile.cl) en la temporada estival, esto es entre octubre y marzo de cada año.

En 2005 se hizo un estudio sobre la fotoquímica urbana en Santiago, enfocado principalmente a medición de precursores, pero que incluyó además el modelamiento de aerosoles secundarios y trayectorias (Rappenglück *et al*, 2005). Los resultados de un modelo lagrangiano de trayectorias, acoplado con módulos para aerosoles y fotoquímica, indica que el patrón de trayectorias es distinto para un día en que en Las Condes (LC) y Parque (Q) se presentan altos niveles de O_3 y otro donde sólo la primera estación presenta altos valores. El modelo también indica la formación de aerosoles, por medio principalmente de alquenos y aromáticos, siendo éstos últimos, lejos, los mayores contribuyentes a su formación. La ubicación de las estaciones puede consultarse en la figura 4.

En resumen, en Chile se ha hecho un avance previo considerable en cuanto al trabajo con modelos numéricos para el pronóstico químico, teniendo en la actualidad modelos *estado del arte* como el sistema WRF-CHEM ya corriendo para la zona central del país. Por su parte, trabajos como el de Saide, 2008 han permitido, a través de la modelación inversa, mejorar los inventarios iniciales, datos que son utilizados por los modelos de pronóstico químico como condiciones de borde e iniciales. Sin embargo, en Chile central las observaciones de calidad de aire son escasas, lo cual no ha permitido tener una perspectiva completa del problema de la calidad del aire desde el punto de vista de las mediciones, por lo cual ha sido necesario complementar los datos observados con resultados de modelos numéricos, que han aportado conocimiento especialmente sobre las distribuciones espaciales de las trazas. Además, la mencionada falta de información ha limitado la evaluación de los modelos implementados hasta hoy, por lo cual la intercomparación entre modelos toma gran importancia.

En este contexto, el trabajo con CCATT-BRAMS, modelo *estado del arte*, permitirá tener una herramienta de alto nivel en el pronóstico químico del tiempo de alta resolución sobre el centro del país, la que podrá ser utilizada para la intercomparación de resultados con otros modelos implementados anteriormente. El enfoque del estudio de la calidad de aire a través de modelos numéricos toma especial importancia en función de comprender los mecanismos físicos y químicos detrás del problema de calidad de aire en Santiago, dada la imposibilidad de hacerlo a través exclusivamente de las observaciones producto de la limitada red de observaciones de calidad de aire disponible en Santiago (tanto en cobertura espacial como en la desagregación por especies disponible actualmente). Por lo tanto, los resultados generados por CCATT-BRAMS podrán robustecer el análisis y estudio del problema bajo la óptica de los modelos numéricos. Por otro lado, se espera que CCATT-BRAMS sea una herramienta para el pronóstico operativo de la calidad de aire conectada al mayor centro meteorológico de Sudamérica, CPTEC. Además, en la implementación operacional definitiva del modelo, se podrá contar con datos de condiciones iniciales y de borde meteorológicas del modelo global CPTEC, el cual presenta una resolución horizontal aproximada de 100 km y 27 niveles verticales, que es más alta que la de los reanálisis NCEP usualmente utilizados para alimentar otros modelos de pronóstico químico ($2.5 \times 2.5^\circ$ horizontal). Entre los objetivos de dicho proyecto se cuenta la implementación de pronóstico operacional del tiempo químico

2 Sensibilidad de algunas opciones físicas disponibles en CCATT-BRAMS: topografía, humedad inicial de suelo y capa límite

2.1 Introducción

Con el objetivo de buscar el ajuste adecuado de las opciones físicas disponibles en el modelo, en este capítulo se realizan sensibilidades y evaluaciones previas a las corridas definitivas para algunas opciones físicas presentes en el modelo, tales como esquemas de topografía, factor de humedad inicial de suelo y esquemas de capa límite.

Los resultados de las corridas finales, que se mostrarán en los capítulos 4 y 5, incluyen mejoras en la configuración de CCATT-BRAMS como el ajuste del valor de humedad inicial del suelo, la consideración de los efectos de la topografía y su rugosidad superficial para mejorar el pronóstico de viento cerca de la superficie, que fueron generadas por medio del estudio de sensibilidad presentado a continuación.

Las evaluaciones de las primeras corridas realizadas mostraban en las variables meteorológicas simuladas algunas discrepancias respecto a lo observado, principalmente con la humedad modelada, la cual era subestimada en las corridas producto que el factor de humedad inicial de suelo estaba incorrectamente determinado. Esto también producía problemas en la temperatura modelada, ya que la amplitud diaria eran sobrestimada (temperaturas mínimas más frías y máximas más cálidas que lo observado). Por su parte, la magnitud del viento era sobrestimada en CCATT-BRAMS, producto que no se incluían los efectos de la rugosidad superficial de sub-grilla de la topografía. Finalmente, en las primeras corridas que incluían dispersión, se observó que los máximos diarios eran sobreestimados por el modelo, probablemente por problemas en la representación de la altura de la capa límite.

2.2 Historial de simulaciones previas

Antes de lograr los resultados definitivos de CCATT-BRAMS, que serán presentados en los próximos capítulos, se hizo un trabajo previo que tuvo el objeto de aprender el manejo del

modelo, corregir los aspectos deficientes (sobrestimaciones o subestimaciones de alguna variable modelada), además de definir la conformación definitiva de los dominios a utilizar. Parte de este trabajo exploratorio del modelo fue realizado en visitas de instrucción a CPTC; además se contó en Chile con la presencia de expertos de ese centro de investigación, que visitaron el Centro de Modelamiento Matemático de la Universidad de Chile y la Dirección Meteorológica de Chile, ayudando a implementar el sistema y a impartir la instrucción pertinente.

Inicialmente, se realizaron sólo corridas meteorológicas, las cuales sirvieron como entrenamiento para familiarizarse con el manejo del modelo, donde además se hicieron las primeras tentativas para definir el área de los dominios donde finalmente se modelaría. En las primeras simulaciones se estaban utilizando datos topográficos de baja resolución, respecto a la resolución de los dominios más finos definidos, lo cual fue corregido con posterioridad.

Posteriormente, fueron realizadas las primeras simulaciones para dispersión de CO sobre la cuenca de Santiago, donde fueron incluidos los datos del inventario de emisiones de la ciudad. En esta etapa, las emisiones diarias del inventario eran consideradas como un total (suma de las 24 horas), sobre la cual se aplicaba una curva gaussiana bimodal para intentar representar el ciclo diario de las mismas (figura 3), por lo tanto en el modelo no se aprovechaba la información temporal disponible en los inventarios.

Al hacer las primeras evaluaciones de razones de mezcla de CO, se apreciaba que los máximos diarios estaban desfasados temporalmente, producto que la curva gaussiana no representaba adecuadamente el ciclo de emisión. Este aspecto fue mejorado a través de la inclusión en el modelo, en forma horaria, de las emisiones del inventario de Santiago, con lo cual se consideró exactamente el ciclo diurno de estas, sin necesidad de simular con curvas gaussianas dicho comportamiento. La tabla 6 incluye una cronología del trabajo, que describe los pasos previos en el trabajo con el modelo y los ajustes a la configuración del mismo requeridos para la obtención de los resultados finales.

Tabla 6. Cronograma de simulaciones realizadas con CCATT-BRAMS, desde el comienzo del trabajo con el modelo en Chile hasta la consecución de los resultados finales para esta tesis.

| Fecha | Descripción de simulaciones |
|-------------------------------|--|
| Agosto 2007 – Noviembre 2007 | Primeras corridas meteorológicas sobre la zona central de Chile. Configuración del modelo sin modificaciones respecto al usado en Brasil. |
| Diciembre 2007 – Octubre 2008 | Corridas incluyen dispersión de trazas (CO). Inventario local de emisiones fue considerado en el modelo como una suma diaria de emisiones, con una curva gaussiana que simulaba ciclo diario. Razones de mezcla de CO modeladas mostraron desfase respecto a observaciones, por limitaciones de curva gaussiana en representación de ciclo diario de emisiones, mientras que existía una sobrestimación de los valores en varias estaciones. Resultados meteorológicos modelados mostraron subestimación de la humedad y sobrestimación en amplitud de ciclos diarios de temperatura (problemas de humedad inicial de suelo). Magnitud del viento sobrestimada (factor de rugosidad por topografía no incluido en la configuración). |
| Noviembre 2008 – Julio 2009 | Desarrollo de pre-procesador de emisiones en el modelo, que permite leer emisiones del inventario local en forma horaria (Saulo Freitas). Mejoramiento de resultados en simulación de razones de mezcla de CO, tanto en la fase de los ciclos diarios de CO como en las magnitudes del mismo, respecto a las simulaciones previas. Consideración del factor de rugosidad del viento en las simulaciones permite reducción de la sobrestimación del viento en las estaciones. Ajustes en la configuración de la humedad inicial de suelo permite mejorar los resultados de temperatura y humedad en el modelo, respecto a las simulaciones previas. |
| Agosto 2009 – Julio 2010 | Se considera en el modelo un módulo fotoquímico, que permite realizar simulaciones de ozono y precursores sobre la zona central de Chile, con los datos horarios del inventario local de emisiones de Santiago. |

2.3 Sensibilidad de esquemas de topografía en Brams

2.3.1 Descripción del problema

Dada las abruptas características que presenta el relieve en Chile, en particular en la zona central del país, se considera conveniente evaluar la representación que cualquier modelo de mesoescala realice de la topografía en la zona donde se quiera simular, en especial si ésta considera terreno complejo, con el objeto de saber en qué medida el modelo será capaz de representar los rasgos locales de la meteorología presente. Por ejemplo, para la zona central del país, se observan características climáticas que son fuertemente influenciadas por la orografía, tales como los flujos de valle-montaña presentes en la cuenca de Santiago y los

episodios de intensos vientos catabáticos del Este, que se dirigen al valle producto del enfriamiento de las superficies de las laderas, los cuales contribuyen a una estabilización atmosférica propia de los periodos de mala ventilación (Rutland y Garreaud, 2003); las intrusiones de aire proveniente de la costa que son conducidas por las depresiones topográficas, los efectos de la orografía sobre la precipitación, entre otros.

A pesar de contar en las simulaciones con datos de entrada topográfico de aproximadamente 1 km. de resolución, al elegir en el modelo grillas horizontales más gruesas se pierde parte del detalle de dicha información. Por lo tanto, se hace importante elegir una parametrización orográfica en el modelo que permita preservar las principales características del relieve, a pesar de la pérdida natural de la calidad al elegir grillas de menor resolución que los datos de entrada. Lo que persigue esta sensibilidad es ver si existen diferencias relevantes entre las distintas parametrizaciones disponibles y comparar las altitudes consideradas en el modelo con las observadas.

En principio, los experimentos de sensibilidad de topografía estuvieron pensados en inter-comparar los resultados obtenidos por las distintas parametrizaciones. Sin embargo, dichos resultados no indicaron mayores diferencias de alturas entre las parametrizaciones consideradas (no mostrado). Por lo tanto, la evaluación de los perfiles de topografía observados (considerando como observados los datos USGS) y modelados será realizada considerando el esquema "average", que es el usado actualmente en forma operativa por CCATT-BRAMS en Brasil.

2.3.2 Experimentos y comparaciones para la representación orográfica

Fueron extraídos datos de altura de topografía de una simulación que utilizó dos dominios: uno grueso de 15 km de resolución y otro fino, de 3 km; desde éste último fueron sacados los datos para las comparaciones a presentar en esta sección. En la vertical se consideran 38 niveles, de los cuales 13 están bajos los 2000 metros y con el nivel más cercano a la superficie ubicado a 40 metros de altura.

Los datos topográficos extraídos de las simulaciones fueron comparados con los datos de topografía de USGS de 30s de resolución (aproximadamente 1 km), que son usados como datos de entrada en el modelo y las comparaciones fueron hechas en tres perfiles latitudinales entorno a la cuenca de Santiago: uno sobre los 33°S, que representa una ubicación al norte de la cuenca (A-A'), otro en 33,5°S, corte que atraviesa la de la cuenca, donde se ubica la ciudad de Santiago (B-B') y otro en 33,8°S (C-C'), que representa el límite sur de la cuenca (figura 5).

Además se hizo una comparación a lo largo de corte longitudinal (D-D'), que representa la zona ubicada inmediatamente al oeste del área urbana de Santiago, la cual comunica naturalmente a la cuenca con la zona costera.

2.3.3 Resultados

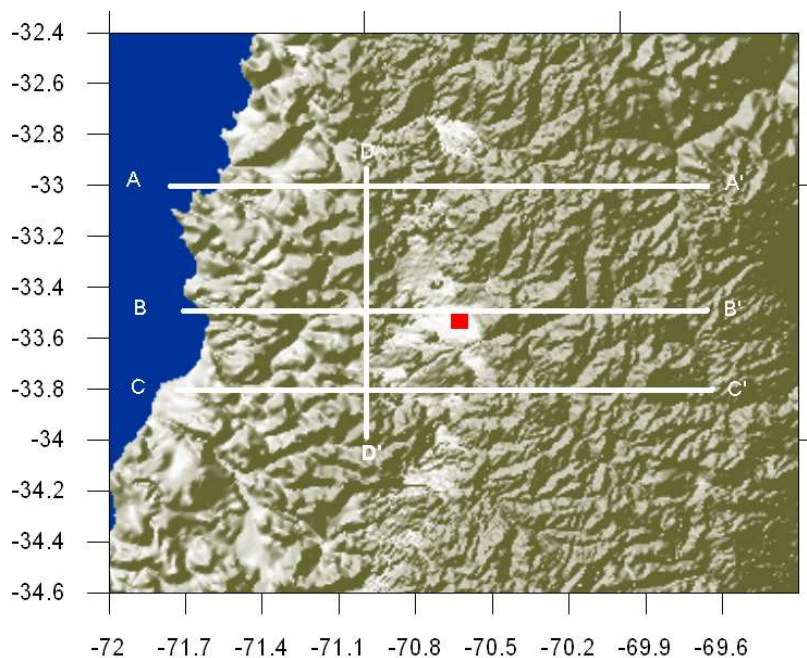


Figura 5. Topografía de 1 km de resolución de la zona central del país y cortes latitudinales donde serán realizadas las comparaciones. El cuadro rojo señala la ubicación aproximada de la ciudad de Santiago.

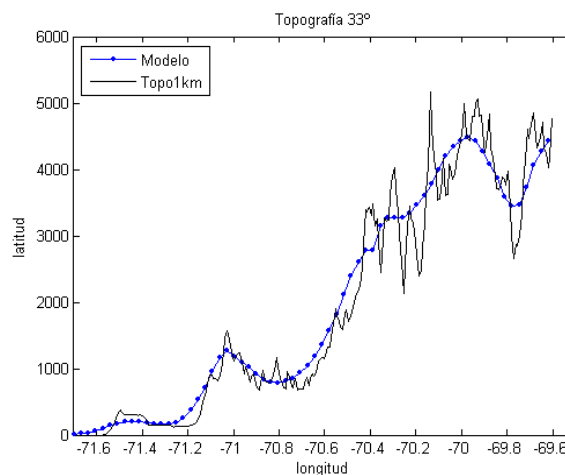


Figura 6. Corte latitudinal de topografía A-A' en -33°. Topografía observada USGS (1 km) y topografía modelada de 3km de resolución.

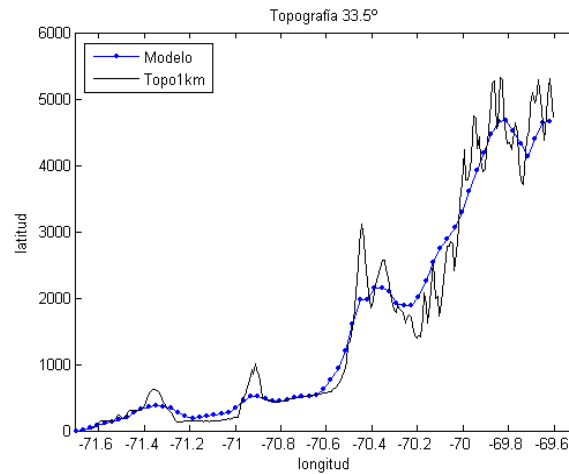


Figura 7. Corte latitudinal de topografía B-B' en -33.5° . Topografía observada USGS (1 km) y topografía modelada de 3km de resolución.

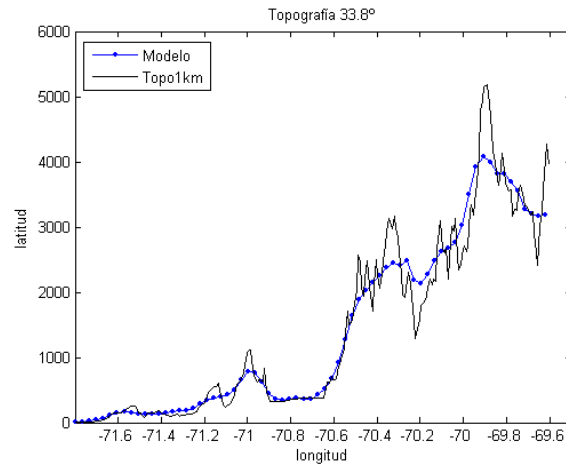


Figura 8. Corte latitudinal de topografía C-C'. Topografía observada USGS (1 km) y topografía modelada de 3km de resolución.

La figura 6 muestra el perfil latitudinal de relieve en -33°S (corte A - A'), que secciona el límite norte de la cuenca de Santiago, conocido como el cordón de Chacabuco, que es una pequeña cadena montañosa transversal de dirección oeste-este. Se aprecia que la topografía que considera el modelo es una buena aproximación a los datos USGS, especialmente entre -71.6 y -70.4°W , donde son bien representados los máximos de alturas y planicies presentes en el tramo, considerando que el modelo suaviza las variaciones abruptas en la altura, producto que la resolución escogida en el mismo es menor que la de los datos USGS. Desde los -70.4°W al este, la estimación orográfica del modelo se degrada, producto de la alta variabilidad de la altura en la zona de la cordillera de Los Andes, que es del orden de miles de metros en décimas de grados de longitud, lo cual hace que el promedio no sea una buena representación de lo observado en ese tramo. Por su parte, en la figura 7 se aprecia el corte B – B', en la latitud 33.5°S , que atraviesa la ciudad de Santiago aproximadamente entre -70.7 y -70.6°W . Se observa una planicie ubicada entre -71.2 y -71.0°W , rodeada de dos máximos relativos de

topografía centrados en -71.3 y -70.9°W respectivamente, que representan la cordillera de la costa. En este tramo, los datos de topografía del modelo sobrestiman levemente la altura media de dicho valle y subestiman marcadamente dichos máximos, especialmente el ubicado en -70.9°W (diferencia aproximada de 500 metros). La zona de la depresión intermedia, entre -70.8 y -70.5°W , es mejor representada por el modelo; mientras que la pendiente orográfica donde empieza el ascenso de la cordillera de los Andes (entre -70.6° y -70.5°W) es representada por el modelo en forma suave respecto a los datos USGS, lo cual introduce diferencias de altitud entre los datos observados y modelados de hasta 1000 m en algunos puntos. Finalmente la figura 8 muestra el corte C – C' que representa la parte sur de la cuenca, en una zona llamada Angostura de Paine. Se observa que entre los -71.6 y -71.0°W el modelo hace una buena representación media de la orografía, aunque los dos máximos relativos ubicados en -71.2 y -71.1°W , respectivamente, no son considerados como tales, sino sólo como una planicie en ascenso. Entre los -71.0 y -70.5°W el modelo representa la topografía en forma cercana a los datos USGS, mientras que desde los -70.5°W al este, donde se ubica la cordillera de Los Andes, la estimación no es buena debido a la gran variabilidad presente en la altitud.

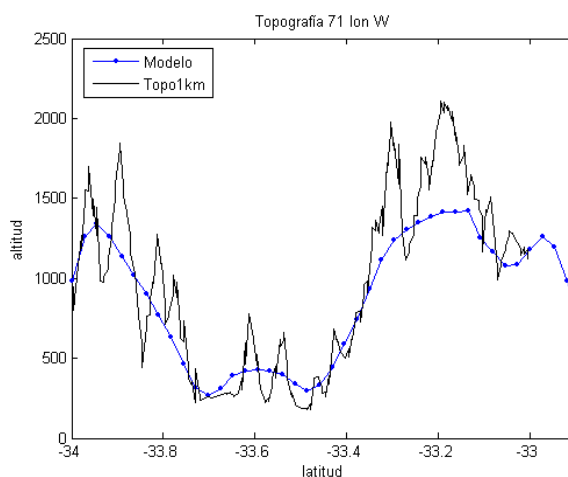


Figura 9. Corte longitudinal de topografía D-D'. Topografía observada USGS (1 km) y topografía modelada de 3km de resolución.

Finalmente, la figura 9 presenta un corte D – D', a lo largo de -71°W , entre las latitudes -34 y -33 , el cual se ubica al oeste del área urbana de Santiago, donde se puede apreciar la depresión orográfica debida a la presencia del río Maipo, el cual se sitúa entorno a los -33.7°S . La presencia de este accidente geográfico es importante, ya que es una vía que favorece la intrusión de aire costero hacia el valle de Santiago, en confluencia además con otros factores de tipo meteorológico. Por lo tanto, es importante que dicho rasgo pueda ser adecuadamente representado por cualquier modelo de mesoescala implementado para la zona. En forma general, y sin considerar las variaciones de pequeña escala espacial, el modelo representa en

forma aceptable las alturas especialmente entre -34.0 y -33.4°S , en especial la depresión correspondiente al valle de Maipo, que “conecta” meteorológicamente las condiciones presentes en la zona costera con las presentes en el interior de la región, donde se ubica Santiago. Sin embargo hacia el norte, entre los -33.4 y -33°S , la orografía del modelo subestima casi en 800 metros la altitud del relieve respecto a los datos USGS, lo cual provocaría una notable disminución de la barrera topográfica natural al ingreso de aire desde la costa hacia el interior, que podría inducir en el modelo un sobre-pronóstico de transporte húmedo a los valles, en el rango de latitudes indicado.

En la tabla 7 se hace una comparación entre las altitudes observadas de algunas estaciones incluidas en la tabla 4, con la altitud que considera CCATT-BRAMS para las mismas.

Se evidencia que las mayores diferencias entre la topografía observada y modelada se presentan principalmente en las estaciones con las mayores altitudes, como La Dormida, Lo Prado, El Manzano y La Reina. Para las dos primeras, ubicadas en la zona de la cordillera de la costa, el modelo subestima la altitud en alrededor de 500 metros, en concordancia con la subestimación de las alturas de la cordillera de la costa mencionada anteriormente (figura 6 y 7), que indica que el modelo subestimaría el obstáculo al aire proveniente de la costa, con lo cual se podría esperar un mayor transporte húmedo hacia la cuenca por este efecto; mientras que para El Manzano y La Reina, el modelo sobrestima de manera importante la altitud (entre 400 y 600 metros), producto de la ubicación pre-cordillerana de éstas, zona donde se presentan abruptas variaciones de altitudes que no son representadas por el valor estimado en la parametrización, lo cual podría en el modelo llevar a estimar temperaturas superficiales más bajas que las observadas en estos puntos (por la mayor altitud), generando así, por ejemplo, que la estabilización del perfil térmico modelado difiera respecto al que se observaría. La excepción, respecto a las estaciones de mayor altitud, es Cuesta Chada, la cual muestra un error comparativamente menor que las otras de este grupo (80 metros). El resto de las estaciones, que están ubicadas en los valles interiores de la zona central, presentan en general menor error en la altitud modeladas que las estaciones de mayor altura. Dicho error, en términos de valor absoluto, varía entre los 10 y 50 metros.

Tabla 7. Altitud modelada de algunas estaciones consideradas para la evaluación del modelo y diferencia observación - modelo.

| Estaciones | Altitud modelada CCATT-BRAMS (m) | Diferencia obs – mod (m) |
|-----------------------|---|---------------------------------|
| Entel | 539 | 15 |
| La Platina | 643 | 9 |
| Cuesta Chada | 616 | 80 |
| Codigua | 147 | -16 |
| La Dormida | 950 | 463 |
| Lo Prado | 558 | 507 |
| Mallarauco | 195 | -39 |
| El Manzano | 1525 | -651 |
| La Reina | 1072 | -392 |
| El Paico | 267 | -12 |
| Pudahuel - aeropuerto | 426 | 50 |

2.4 Sensibilidad del factor de humedad inicial de suelo de Brams

2.4.1 Descripción general

Las estimaciones de características superficiales tales como contenido de humedad, temperatura, intercambio de energía entre las capas del suelo y su efecto sobre la atmósfera (y viceversa), son realizadas en el modelo por un módulo dentro de CCATT-BRAMS llamado LEAF-2, el cual es un modelo de pronóstico para la temperatura y contenido de humedad del suelo, cobertura de nieve, vegetación y canopia, e incluye intercambios radiativos y turbulentos entre la superficie y la atmósfera, según lo descrito por Walko *et al* (2000).

La importancia de definir la humedad inicial de suelo en el modelo de una forma lo más certera posible, tiene que ver con lograr una representación realista de los procesos de evaporación y condensación superficial, los cuales influirán en los procesos relacionados con los flujos de calor sensible y latente, los que a su vez afectarán tanto a la temperatura, el viento así como al contenido de humedad del aire, especialmente de los niveles atmosféricos más cercanos a superficie.

Se espera que distintos valores de humedad de suelo afecten la magnitud de los flujos de calor sensible y latente, así como a variables atmosféricas tales como la temperatura y la humedad

(en especial en niveles cercanos a superficie) y también tengan efecto sobre la magnitud de la capa límite atmosférica.

En esta sección, se mostrarán los resultados de un estudio de sensibilidad que compara cómo se comportan los flujos radiativos superficiales (calor sensible y latente) y variables meteorológicas como la temperatura y razón de mezcla de vapor de agua superficial (a 2 metros) ante distintos valores de inicialización de humedad superficial.

2.4.2 Experimentos y comparaciones

Para esta sensibilidad se realizaron tres simulaciones con distintos valores de SLMSTR, que fueron de 0.5 (desde ahora, suelo húmedo), 0.4 (suelo semi-húmedo) y 0.3 (suelo seco), todas comenzando el 05 de enero de 2002 a las 00Z y de 192 horas de duración. Las pruebas fueron corridas sobre dos dominios: un dominio grueso de 15 km de resolución y otro más fino, de donde fueron sacados los datos para las comparaciones, de 3 km. En la vertical se consideran 38 niveles, de los cuales 13 están bajos los 2000 metros y con el nivel más cercano a la superficie ubicado a 40 metros de altura. La configuración espacial es descrita en detalle en la sección 3.2 y es mostrada en la figura 16, la cual es común tanto para las otras sensibilidades hechas así como para las simulaciones finales. Las primeras 24 horas de las 3 simulaciones no fueron consideradas en el estudio, producto que al inicio de la corrida el modelo ajusta fuertemente su física a las condiciones iniciales provistas, lo cual puede producir errores en los resultados del mismo. La configuración del modelo en estas simulaciones fue la misma, sólo se modificaron los factores de humedad inicial de suelo. Los datos de condición inicial y de borde meteorológica son provenientes de los reanálisis NCEP.

En la comparación con datos observados fueron elegidas estaciones que representaran el área urbana de la ciudad de Santiago y otras que representaran el sector al occidente de la misma (de características más bien rurales), comparando respectivamente la temperatura y razón de mezcla de vapor de agua a 2 metros de altura. Los resultados de flujos de energía superficial de onda larga de las corridas, tanto de calor sensible como latente, serán comparados entre sí, producto que no se dispone de información observada de estas variables en la zona de estudio.

2.4.3 Resultados modelados de calor sensible y calor latente

La figura 10 muestra los ciclos diarios promedios (hora a hora) de calor sensible y latente, usando diferentes valores de humedad inicial de suelo, sobre un punto representativo del área

urbana de la ciudad de Santiago (-33.5°S , -70.6°W). Como se observa en la figura, mientras más húmedo sea el suelo existe un mayor predominio de calor latente en el ciclo simulado, como se observa especialmente cuando usando un suelo húmedo. Por el contrario, usando el suelo seco, durante la parte diurna del ciclo el calor sensible predomina en magnitud sobre el calor latente.

La razón de Bowen, entre las magnitudes máximas diarias de calor sensible y latente en el ciclo, es variable según la humedad de suelo inicial escogida, ya que con el suelo húmedo la proporción es de 0.7, con el suelo semi-húmedo es de 1.3 y en el caso seco dicha razón llega a 4.

Considerando las características climáticas medias que presenta Santiago durante el verano austral, donde predominan en la cuenca condiciones cálidas y secas, debiera esperarse en el balance radiativo superficial un notable predominio diurno de los flujos de calor sensible sobre el de calor latente.

Por lo tanto, probablemente el ciclo de balance energético más parecido al real sea el que tiene la simulación con suelo seco, teniendo que hablar en términos condicionales debido a que no se cuenta con datos observados de calor sensible y/o latente de la ciudad de Santiago para una comparación objetiva, por lo cual habrá que corroborar a través de otros medios si realmente este balance energético superficial es el adecuado. Las comparaciones de humedad superficial (sección 2.4.4) y temperatura (sección 2.4.5) podrán dar una mejor idea de esto.

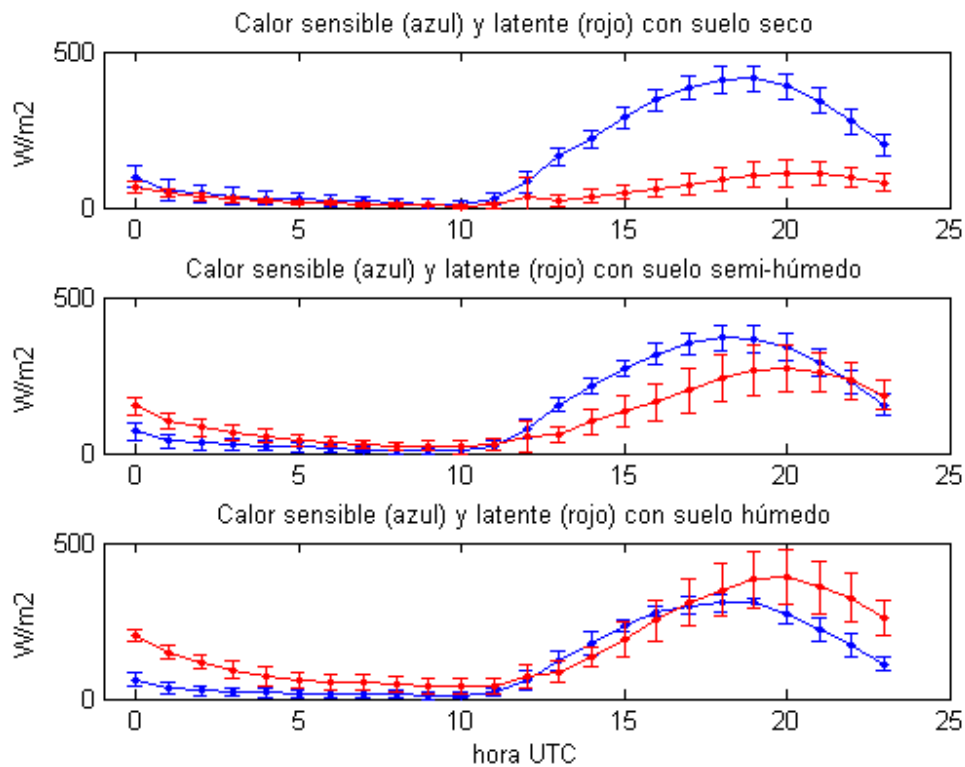


Figura 10. Ciclo diario promedio de calor sensible (azul) y latente (rojo) para simulaciones con suelo seco (figura superior), suelo semi-húmedo (figura intermedia) y suelo húmedo (figura inferior). Las barras indican ± 1 desviación estándar.

Por otro lado, al iniciar estas pruebas con distintas humedades iniciales de suelo, se utilizó en la primera sensibilidad un factor de humedad inicial de 0.5. Este valor fue escogido en referencia a simulaciones previas (reseñadas en la tabla 6), donde se habían conseguido resultados entorno a lo observado para variables meteorológica, aunque con la humedad levemente sobrestimada, utilizando un valor de 0.55.

Sin embargo, al revisar los resultados de la primera sensibilidad (denominada suelo húmedo), se observó que gran parte del ciclo diario estaba dominado por el calor latente (figura 11.b), mostrando incluso un mayor flujo turbulento de humedad que los resultados de las corridas previas, que utilizaban incluso, un factor de humedad mayor (figura 11.a). La única gran diferencia entre ambas corridas fue que en la de la figura 11.a fueron utilizados reanálisis CPTEC, mientras que en la de la figura 11.b se usaron reanálisis NCEP.

Por lo tanto, se puede decir que, para los puntos comparados, el ajuste del valor apropiado de humedad de suelo en la configuración de BRAMS resultó ser sensible al tipo de reanálisis que se utilice en una simulación, ya que para obtener resultados similares entre corridas alimentadas con reanálisis CPTEC y NCEP, se tuvo que definir un factor de 0.55 si se utilizaban

los primeros, mientras que si se tomaban datos NCEP se debió escoger uno entorno a 0.3 (figura 10, inferior).

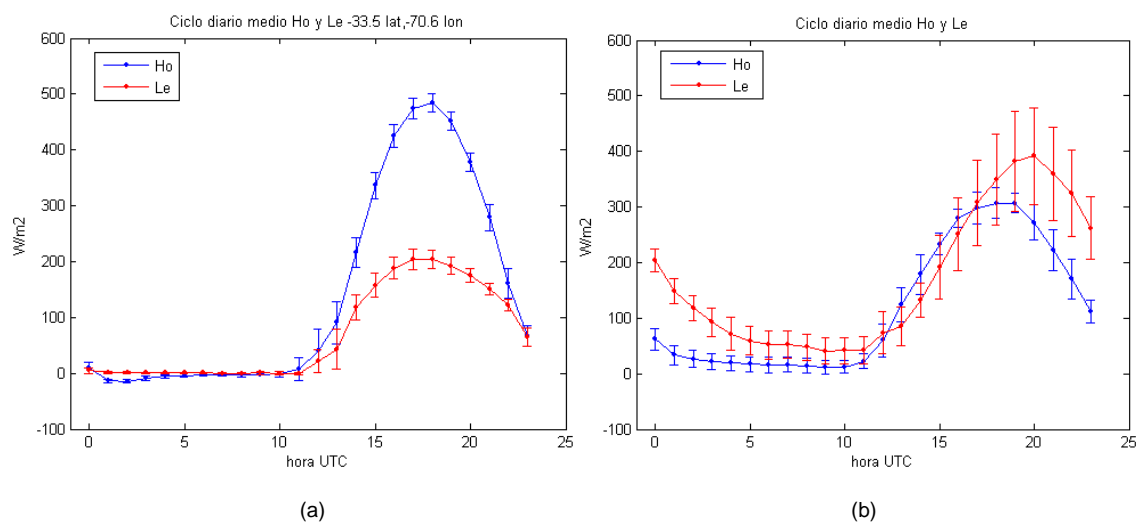
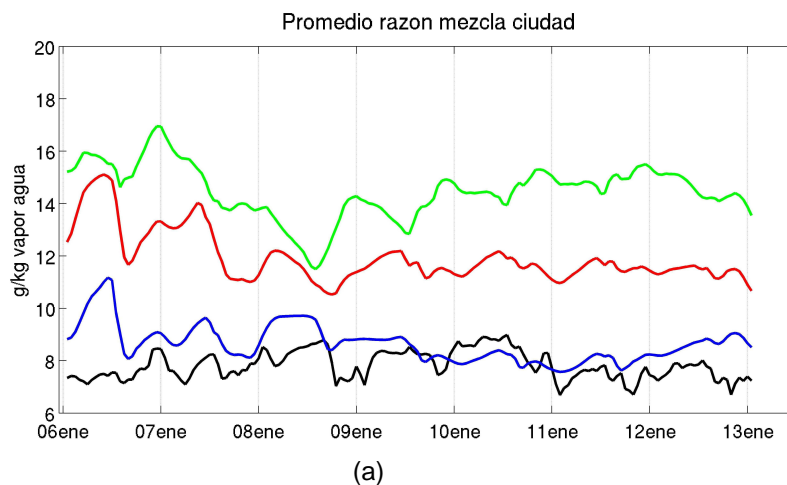


Figura 11. Ciclo diario medio de calor sensible (Ho) y latente (Le) utilizando reanálisis CPTEC (a) y reanálisis NCEP (b) con valores de factor de humedad inicial de suelo de 0.55 y 0.5 respectivamente.

2.4.4 Sensibilidad de la razón de mezcla de vapor de agua a 2m

Dado que se sospecha que distintos valores de humedad de suelo afectarán la magnitud de la humedad del aire, en especial en las capas cercanas a la superficie, se evaluará la razón de mezcla de vapor de agua a 2 metros para distintas inicializaciones de humedad de suelo. La comparación entre datos observados y modelados para esta variable fue hecha para dos zonas geográficas de interés: una es la zona urbana de la ciudad de Santiago, donde fueron consideradas las estaciones de La Reina, Pudahuel, La Paz y La Florida, mientras que también fue analizada la zona ubicada al occidente de la cuenca de Santiago, representada por las estaciones de Mallarauco y El Paico, donde predominan condiciones de suelo más bien rurales.



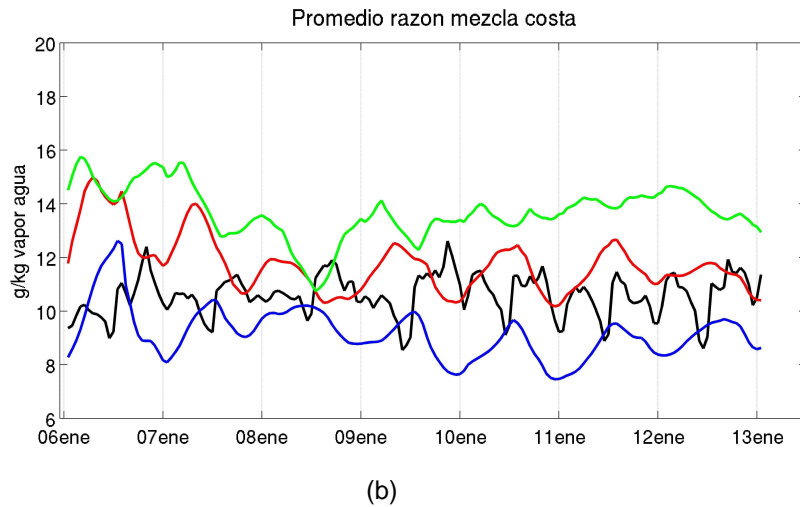


Figura 12. Razón de mezcla de vapor de agua promedio observada y simulada usando distintas humedades de suelo, para zona urbana (a); para zona rural al oeste del área urbana (b). En color negro los datos observados, en azul para suelo seco, en rojo para suelo semi-húmedo y en verde para suelo húmedo.

En la figura 12 se observa la serie de tiempo promedio de las estaciones urbanas y de las ubicadas al occidente del área urbana, tanto de razón de mezcla observada como simulada para distintos valores de factor de humedad inicial de suelo. En la figura 12.a, que representa las estaciones ubicadas en la zona urbana, se aprecia que la serie de tiempo de humedad obtenida usando un suelo seco es la más cercana en magnitud a la serie de tiempo de humedad observada, lo cual indica que ése valor del factor de humedad es el más apropiado de utilizar, respecto a un suelo semi-húmedo y húmedo, ya que en estos últimos el modelo sobrestima de forma considerable la humedad. Esto corrobora la idea anteriormente obtenida, después de analizar los flujos de calor sensible y latente en las corridas, que con el denominado suelo seco se podían representar adecuadamente los balances de energía y la magnitud de la humedad, utilizando reanálisis NCEP.

Por su parte, en la figura 12.b se muestran las series de tiempo de humedad para la zona ubicada al occidente del área urbana, que presenta una característica de suelo más bien rural. Se aprecia que usando un suelo seco se subestima levemente la humedad, mientras que por el contrario se sobrestima un suelo semi-húmedo. Esto indica que un valor intermedio del factor de humedad inicial entre ambos suelos sería el más apropiado para representar en magnitud la razón de mezcla de vapor de agua en esa zona.

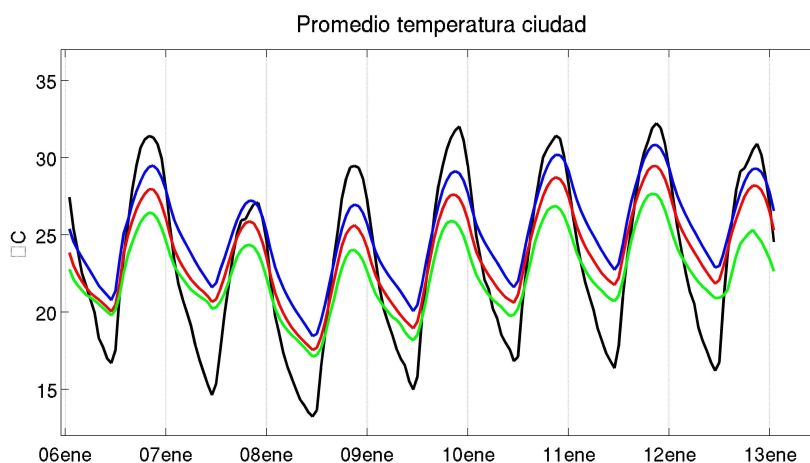
En resumen, el valor usado del factor para el suelo seco tuvo mejores resultados en estaciones urbanas que en las otras ubicadas al occidente de la ciudad usando reanálisis NCEP, esto debido probablemente a que ambos sectores presentan características de suelo distintas, entre

ellas distinto contenido de humedad de saturación del mismo, η_s ; por lo tanto, con este tipo de inicialización de humedad (homogénea), en algunas zonas con características de suelo determinadas el ajuste funcionará mejor que en otras.

2.4.5 Sensibilidad de la temperatura a 2m

Ya que se hipotetiza que la temperatura del aire cercano a la superficie es afectada por distintos valores iniciales de humedad de suelo, se realizó una sensibilidad de la variable usando simulaciones con suelo seco, semi-húmedo y húmedo, definidos estos últimos de la misma forma que en la sección anterior.

Al igual que para la comparación de la sección 2.4.4, para la temperatura se considera un grupo de estaciones que representan condiciones urbanas y otro grupo que representa condiciones más bien rurales, como las estaciones ubicadas al oeste del área urbana. En el primer grupo se promedian las series de las estaciones de La Reina, Pudahuel, La Paz y La Florida, mientras que en el segundo se consideran las de Cuesta Chada, Mallarauco y El Paico.



(a)

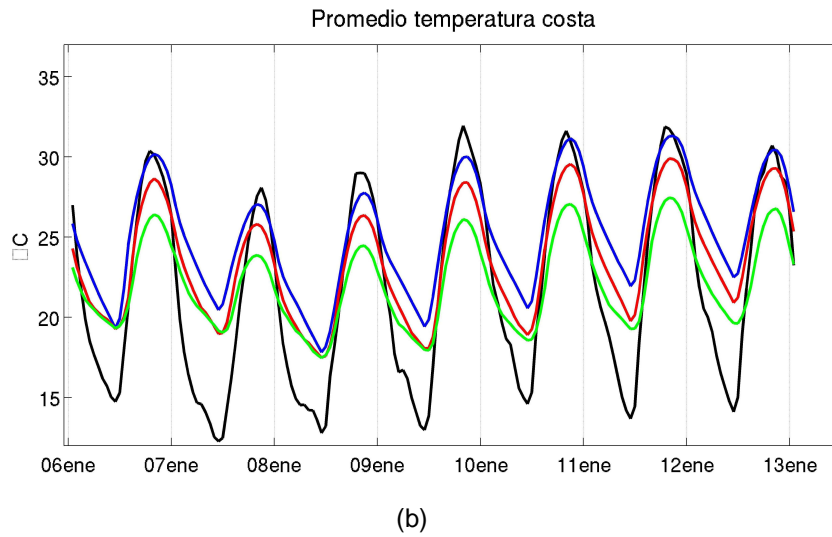


Figura 13. Temperatura promedio observada y simulada usando distintas humedades de suelo, para zona urbana (a); para zona rural al oeste de la ciudad (b). En color negro los datos observados, en azul para suelo seco, en rojo para suelo semi-húmedo y en verde para suelo húmedo.

En la figura 13.a se presentan las series de tiempo promedio de las estaciones urbanas modeladas y observadas, donde se aprecia que en todas las simulaciones se sobrestiman las temperaturas mínimas respecto a las medias observadas. Por su parte, en las temperaturas máximas la simulación que presenta resultados más cercanos a los observados es la con suelo seco, donde además se observa una diferencia cercana a 4 grados entre ésta y la que de suelo húmedo.

Por su parte, la figura 13.b muestra el comportamiento en las estaciones ubicadas al oeste de la ciudad. Con respecto a la temperatura mínima, nuevamente aparece una sobrestimación en todas las corridas de la temperatura mínima. En cuanto a la temperatura máxima, los resultados de la simulación con suelo seco muestran ser más cercanos que los simulados con factores de humedad mayores.

En resumen, puede decirse que la simulación que utiliza suelo seco (factor de humedad inicial de 0.3) presenta mejores resultados que las otras pruebas realizadas con un valor de inicialización de humedad mayor, en particular respecto a los valores de temperatura máxima.

2.5 Sensibilidad de altura de capa límite planetaria en Brams

2.5.1 Introducción

Dado lo importante de una adecuada representación de la altura de la capa límite planetaria (PBL) por parte del modelo, esto es, que sea capaz de simular su evolución diaria, sinóptica, magnitud de su altura, y en último fin que en una simulación se puedan representar las condiciones de dispersión de contaminantes, conviene explorar las parametrizaciones físicas que dispone CCATT-BRAMS, para conocer físicamente cómo son modelados los procesos turbulentos en cada una de ellas, qué representan y cuáles pueden ser aplicadas en el marco de esta investigación, en función del tamaño de las grillas horizontales y verticales que se elegirán.

En esta sección se hará una breve descripción del problema de la turbulencia, los cierres locales y no-locales, el orden de cierre de la turbulencia y qué parametrizaciones pueden ser utilizadas en las simulaciones que se harán en este trabajo de tesis. Finalmente, se mostrarán los resultados del test de sensibilidad, para analizar el comportamiento de la altura de la PBL en cada una de ellas.

Dada la limitante de observaciones de altura de capa límite sobre Santiago, es difícil saber qué parametrización se ajustaría mejor al comportamiento observado. Por lo tanto, la sensibilidad hecha apunta a saber si las opciones físicas disponibles en el modelo presentan diferencias significativas entre sí. En un futuro, se podrá contar con observaciones de la capa límite atmosférica que serán provistas por el equipo LIDAR (Light Detection And Ranging), adquirido recientemente por la Dirección Meteorológica de Chile, el que aportará información valiosa sobre magnitud y evolución de la capa de mezcla en la zona.

2.5.2 Experimentos realizados y resultados

En el caso de las simulaciones realizadas y que se realizarán en este trabajo de tesis, ya que los espaciamientos de grillas horizontales están pensados que sean de menor resolución que los verticales (los primeros del orden de kilómetros y los segundos del orden de metros), se harán las sensibilidades sólo con los esquemas de turbulencia que pueden ser aplicados, dadas las condiciones de espaciamiento de grilla impuestas. Estos son el esquema de deformación

anisotrópica, local y el esquema deformación horizontal / Mellor – Yamada vertical, 1974 y 1982).

Para esta sensibilidad fueron realizadas 2 simulaciones, una utilizando un esquema local y otra con un esquema también local pero con consideraciones no locales (desde ahora llamado no-local), respectivamente. Ambas corridas fueron hechas entre el 05 de enero de 2002 a las 00Z y el 13 de enero a las 00Z. Las pruebas fueron corridas sobre 2 dominios: uno grueso de 15 km de resolución y otro fino, de donde fueron sacados los datos, con 3 km de resolución. En la vertical se consideran 38 niveles, de los cuales 13 están bajos los 2000 metros y con el nivel más cercano a la superficie ubicado a 40 metros de altura. Las primeras 24 horas de las 2 simulaciones no fueron consideradas en el estudio. La configuración del modelo en estas simulaciones fue la misma, sólo se modificaron las opciones de parametrización de turbulencia. Los datos de condición inicial y de borde meteorológica fueron los provenientes de reanálisis NCEP.

Los resultados de altura de capa límite obtenidos usando distintas parametrizaciones fueron sólo comparados entre sí, ya que no se cuenta con observaciones de altura de capa límite en la cuenca de Santiago.

Ciclo diario de la altura de capa límite planetaria

La figura 14 muestra los ciclos diarios promedios (hora a hora) de la altura de la capa límite planetaria, usando un esquema local y no local, donde los resultados son tomados de un punto representativo del área urbana de la ciudad de Santiago (-33.5°S, -70.6°W). Se puede ver que en forma general ambas corridas muestran valores similares de altura de PBL, mostrando ambas la máxima reducción a las 10 horas UTC (7 am, hora local de verano en Santiago). Por su parte, la mayor altura de la capa de mezcla fue observada a las 21 horas UTC (6 pm local) en el esquema de turbulencia local y las 22 horas UTC (7 pm local) en el esquema no-local. Se puede apreciar que durante gran parte de las horas del día, el esquema local muestra alturas de PBL levemente mayores a las estimadas usando un esquema no-local, sin embargo las diferencias no sobrepasan los 150 metros.

Respecto a la evolución horaria de la PBL durante el día, existen algunas diferencias entre ambos esquemas, ya que la parametrización local de turbulencia muestra un ciclo diario menos perturbado, esto quiere decir que el ascenso y el descenso diurno de la PBL es gradual, o

suave. Sin embargo, en el esquema de turbulencia no-local se producen variaciones de alta frecuencia dentro del ciclo diario.

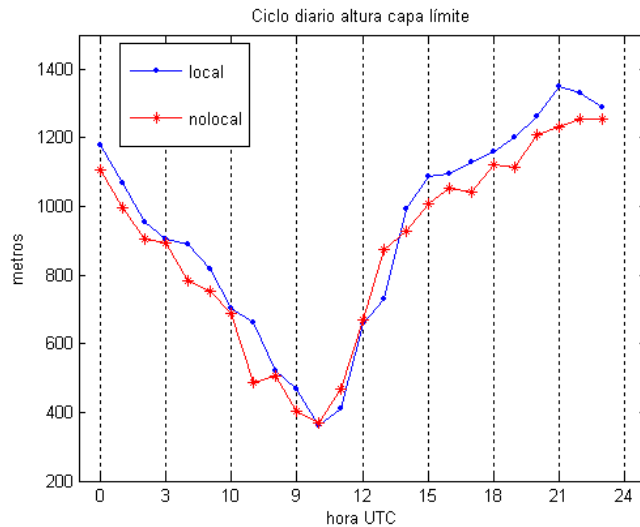


Figura 14. Ciclo diario de altura de PBL para esquema local y no-local de turbulencia.

Es necesario decir que el mínimo de PBL que se alcanzan con ambos esquemas está entorno a los 400 m, lo cual probablemente esté sobrestimado, considerando el fuerte proceso de estabilización nocturno que se produce en la cuenca de Santiago producto del enfriamiento radiativo. Esto puede explicarse por la sobrestimación que el modelo hizo de las temperaturas mínimas en las pruebas de sensibilidad (mostrado anteriormente), lo cual produciría una estabilidad atmosférica nocturna menor a la observada, por ende mayores condiciones de mezcla; aunque en estricto rigor para verificar esto se debe revisar otras variables, como el perfil vertical de temperatura potencial, lo cual fue realizado en la sección 4.7.2 de este trabajo.

En general, se puede decir que las diferencias en el comportamiento del ciclo diario de altura de la PBL, debidas a la elección de una parametrización de turbulencia, son más bien menores; aunque en el esquema no-local aparecen fluctuaciones de alta frecuencia, probablemente debidas a transporte turbulento del TKE, situación no observada en los resultados del esquema local.

Sensibilidad con distintos factores de humedad inicial de suelo

Ahora, como parte de la sensibilidad hecha anteriormente para distintos valores de inicialización de humedad de suelo, se obtuvieron los ciclos diarios de altura de PBL respectivo de cada simulación, usando las mismas características de humedad de suelo (suelo seco, semi-húmedo y húmedo), lo cual se muestra en la figura 15. En los tres casos se usó un esquema no-local de parametrización de turbulencia.

En esta comparación, se observa que las magnitudes del ciclo y el comportamiento del mismo es altamente sensible al valor inicial de suelo, ya que en el caso del suelo húmedo, la máxima altura del ciclo diario es aproximadamente 400 metros menor que la respectiva del ciclo diario usando un suelo seco, las cuales además presentan un desfase temporal de 2 horas. Probablemente, la diferencia en la altura máxima de la mezcla pueda estar dada debido a que el crecimiento diurno de la capa límite está fuertemente influenciado por la convección, a causa de los flujos de calor sensible, que en el caso del suelo seco son más dominantes que en el caso de suelo húmedo (figura 10).

No sólo se ven afectadas las magnitudes de la altura de la PBL, sino también la forma del ciclo, ya que, por ejemplo, en el ciclo diario del suelo húmedo se aprecia que en horas de la mañana se produce un primer mínimo de la altura de la PBL a las 08 horas UTC, ocurriendo posteriormente un segundo mínimo a las 12 horas UTC. En el caso de la simulación con el suelo seco, se observa la ocurrencia sólo de un mínimo diurno, en cual sucede a las 10 horas UTC. Por lo tanto, se puede decir que un distinto factor de humedad de suelo tiene un efecto notable en la magnitud y evolución de la altura de la PBL, el cual es incluso mayor que el debido al uso de un distinto esquema de turbulencia.

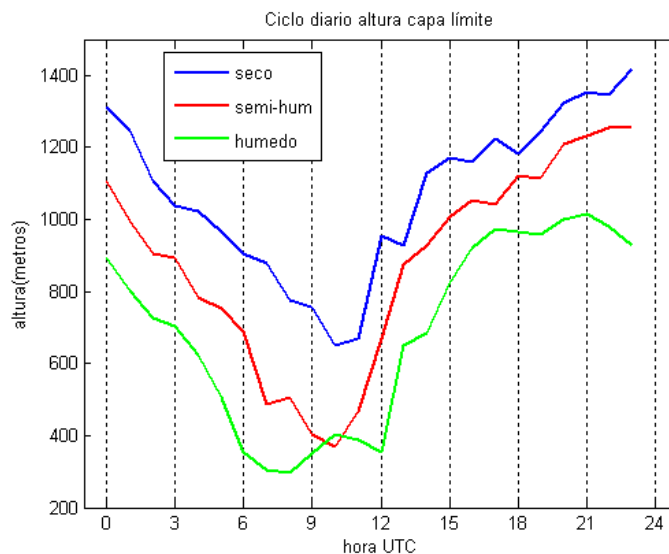


Figura 15. Ciclo diario medio de altura de PBL para distintos valores de humedad inicial de suelo, usando un esquema no-local de turbulencia.

2.6 Conclusiones generales

- Las primeras sensibilidades hechas con esquemas de topografía no indicaron mayores diferencias topográficas entre uno y otro; por lo tanto se optó por elegir el esquema “average”, el cual es actualmente usado en forma operativa por CCATT-BRAMS en Brasil.
- Respecto a la caracterización topográfica modelo/USGS, en el perfil latitudinal en -33.5°S , la pendiente simulada de la cordillera de Los Andes entre -70.6 y -70.5°W es menor que la observada, lo cual podría producir diferencias en la intensidad de los flujos catabáticos presentes durante la noche, pudiendo ser en el modelo de menor magnitud. Para la misma figura, dado que el modelo presenta menor diferencia, respecto a los datos USGS, entre las alturas del tope de la cordillera de la costa (aproximadamente en -71°W) y la depresión intermedia ubicada hacia el este, se podría suponer que el modelo que no representará adecuadamente los calentamientos diferenciales de ladera, que afectarían a su vez a los flujos locales de viento en el sector. Por otro lado, la subestimación de las alturas en el perfil longitudinal entre los -33.4 y -33.0°S , probablemente producirán una sobrestimación del transporte de aire entre la costa y la cuenca de Santiago.
- En cuánto a la sensibilidad hecha para humedad inicial de suelo, los resultados de las simulaciones mostraron ser afectados por los diferentes valores de éste factor, ya que se observaron diferencias en los flujos superficiales de energía, la temperatura y humedad superficial en los diferentes experimentos realizados. En el caso de esta sensibilidad, la corrida en la que se utilizó un suelo seco ($\text{SLMSTR}=0.3$) mostró mejores resultados que las otras simulaciones que usaron una humedad inicial de suelo más alta, esto para una inicialización del modelo con datos NCEP.
- El uso de distintos datos de condiciones atmosféricas iniciales y de borde requiere ajustar un valor particular del factor de humedad de suelo para lograr representar adecuadamente los flujos de energía superficial y las variables meteorológicas de una zona determinada. Por ejemplo, usando reanálisis CPTEC, el valor del factor de humedad inicial de suelo con el que se obtienen resultados entorno a lo observado es aproximadamente de 0.5; mientras que utilizando reanálisis NCEP, se encontró que el factor de humedad debe estar alrededor de 0.3.

- Respecto a la sensibilidad de parametrización de turbulencia, los resultados de las simulaciones usando esquemas de turbulencia locales y no-locales mostraron diferencias menores, principalmente respecto a la magnitud de los ciclos diarios medios de altura de PBL. Se apreciaron diferencias en las variaciones intradiarias, ya que el esquema no-local mostró fluctuaciones de alta frecuencia en la altura de PBL que no fueron notorias en los esquemas locales.

- El comportamiento y magnitud del ciclo diario de la capa límite planetaria presentó alta sensibilidad a distintos factores de inicialización de humedad de suelo, mostrando el suelo húmedo menores alturas de PBL que el suelo seco. Incluso se apreciaron diferencias en la forma del ciclo según el factor de humedad con que se inicializara la simulación. Según lo encontrado en éste estudio de sensibilidad, se considera más importante el efecto de la humedad de suelo que el tipo de esquema de parametrización de turbulencia sobre el comportamiento de la altura de la PBL, lo cual indica nuevamente la importancia de ajustar un valor apropiado del factor de humedad de suelo en las simulaciones a realizar.

- Es importante considerar que un determinado ajuste del factor de humedad inicial de suelo producirá mejores resultados en algunas zonas que en otras, lo cual obedece principalmente al tipo de suelo que es ingresado en el modelo como condición de borde. Como se apreció en las figuras 12 y 13, las simulaciones con suelo seco (con factor de humedad 0.3) ajustaron mejor los resultados modelados de razón de mezcla de vapor de agua y temperaturas a 2 metros en la zona urbana que en la zona rural. Esta es una limitante de este tipo de inicialización de humedad de suelo (homogénea), la cual fue mejorada en Gevaerd y Freitas, 2006 a través de un esquema de tipo heterogéneo. Sin embargo, ya que la zona central de Chile presenta veranos prácticamente sin lluvias, probablemente esta inicialización de humedad de suelo no tenga la importancia que sí tiene en climas con marcados periodos de precipitación.

3 Configuración final de simulación y descripción de los métodos de verificación de resultados

3.1 Introducción

En este capítulo se hará una descripción de la configuración final definida en CCATT-BRAMS para la simulación meteorología-dispersión y fotoquímica. Finalmente se explicará en qué forma el modelo será evaluado estadísticamente, detallando los métodos utilizados para ello.

Con el modelo CCATT-BRAMS se pretenden reproducir los rasgos más importante de la variabilidad meteorológica, la dispersión de trazas y las condiciones fotoquímicas en la cuenca de Santiago, esto es a escala regional y urbana. Por lo mismo, en una primera parte se eligió correr el modelo sólo considerando meteorología y CO, lo cual fue útil para verificar los resultados de transporte y razón de mezcla de la traza, sólo en función de la variabilidad meteorológica, excluyendo el efecto de las reacciones químicas de las especies. En una segunda etapa, se realizó una simulación que consideró procesos fotoquímicos sobre la misma zona, con el objeto de estudiar y evaluar el comportamiento del O₃ y sus precursores.

La implementación computacional del modelo fue hecha en principio en las dependencias del Centro de Modelamiento Matemático de la Universidad de Chile, donde se realizaron las simulaciones previas; además en este momento se trabaja en la implementación operativa del modelo en dicho centro. Las corridas finales hechas para este trabajo de tesis fueron realizadas en los sistemas informáticos de CPTEC, los cuales gentilmente proporcionaron parte de su capacidad de cálculo para tal efecto.

3.2 Configuración espacial y temporal de las simulaciones

El modelo CCATT-BRAMS fue corrido sobre dos dominios: uno grueso de 15 km de resolución horizontal (figura 16), diseñado para capturar los principales rasgos sinópticos presentes en la zona central del país. Gran parte de éste abarca el Océano Pacífico entre los 85 y 72°W, para capturar las perturbaciones baroclínicas provenientes del oeste, mientras que por el norte considera desde los 25°S, incluyéndose en el dominio la zona centro norte del país, donde se desarrollan cíclicamente las bajas presiones costeras (Garreaud, 2002), mientras que por el sur

el dominio llega hasta los 41°S, con lo cual se puede capturar en forma adecuada la incursión de sistemas frontales.

El dominio fino tiene una resolución horizontal de 3 km (figura 16), el cual comprende la Región Metropolitana y parte de la Región de Valparaíso, diseñado en función de determinar las características locales de la variabilidad meteorológica y de la dispersión de contaminantes, que incluye una caracterización topográfica con datos de mayor resolución.

Respecto a la elección del periodo de simulación, fue elegido el mes de enero de 2002, siendo uno de los motivos para ello el establecimiento de condiciones sinópticas más bien homogéneas durante el verano austral. La zona central de Chile durante dicha estación es principalmente dominada por las altas presiones del anticiclón del pacífico sureste, siendo las condiciones anticiclónicas ocasionalmente afectadas por fluctuaciones de alta frecuencia como las descritas en Garreaud *et al*, 2006, tales como bajas presiones costeras, sistemas frontales y/o bajas segregadas.

Otro de los motivos para elegir este periodo fue que, para el mismo, se han realizado trabajos previos como los descritos en Gallardo *et al* 2000, Schmitz, 2005 y 2007 y Saide, 2008, con los cuales se pueden comparar resultados. En el anexo 2 se hace una descripción sinóptica de las condiciones presentes en el periodo de la simulación.

En la vertical, el modelo fue configurado con 38 niveles, estando el primer nivel a 40 (m) de altura y con 13 niveles ubicados bajos los 2000 (m) de altura, en función de estudiar en detalle el comportamiento del espesor atmosférico situado más cerca de la superficie.

Los datos utilizados del modelo para las comparaciones son los obtenidos de la grilla de 3 km de resolución horizontal, tanto para variables meteorológicas como para razones de mezcla de CO, O₃ y otras especies.

Los datos sacados del modelo, representativos de cada estación, fueron obtenidos del punto de grilla más cercano a la estación. En las estaciones de Lo Prado y La Dormida, al existir grandes diferencias entre las altitudes del modelo y las reales, los datos simulados fueron extraídos del nivel vertical más cercano a la altitud real de la estación.

La simulación meteorológica con dispersión se realizó entre las 00Z del 03 de enero de 2002 y las 23Z del 19 de enero de 2002, aunque para los análisis y comparaciones se considera sólo el periodo entre el 05 de enero a las 00Z y el 14 de enero a las 23Z. Se descartaron del análisis estadístico los 2 primeros días de la simulación, producto del error esperado debido al

desbalance entre las condiciones iniciales suministradas y la física del modelo (spin-up). Posterior a este periodo, el modelo ya empieza a simular resultados coherentes con lo observado.

Los datos de los últimos 5 días de la simulación también son apartados del estudio estadístico, ya que posterior al paso de una vaguada en 500 hpa sobre la zona central de Chile y la permanencia en altura de aire frío rezagado de dicha vaguada en el sector (Anexo 2), el modelo no muestra resultados consistentes con lo observado en cuanto a las temperaturas, produciéndose una sobrestimación importante del régimen térmico en todas las estaciones evaluadas.

Por su parte, la simulación fotoquímica fue realizada usando los mismos dominios y similar resolución espacial, aunque el periodo considerado va entre las 00Z del 03 de enero y a las 00Z del 12 de enero. La evaluación de la corrida también dejó las primeras horas de la simulación fuera, por los efectos de *spin-up* recién descritos.

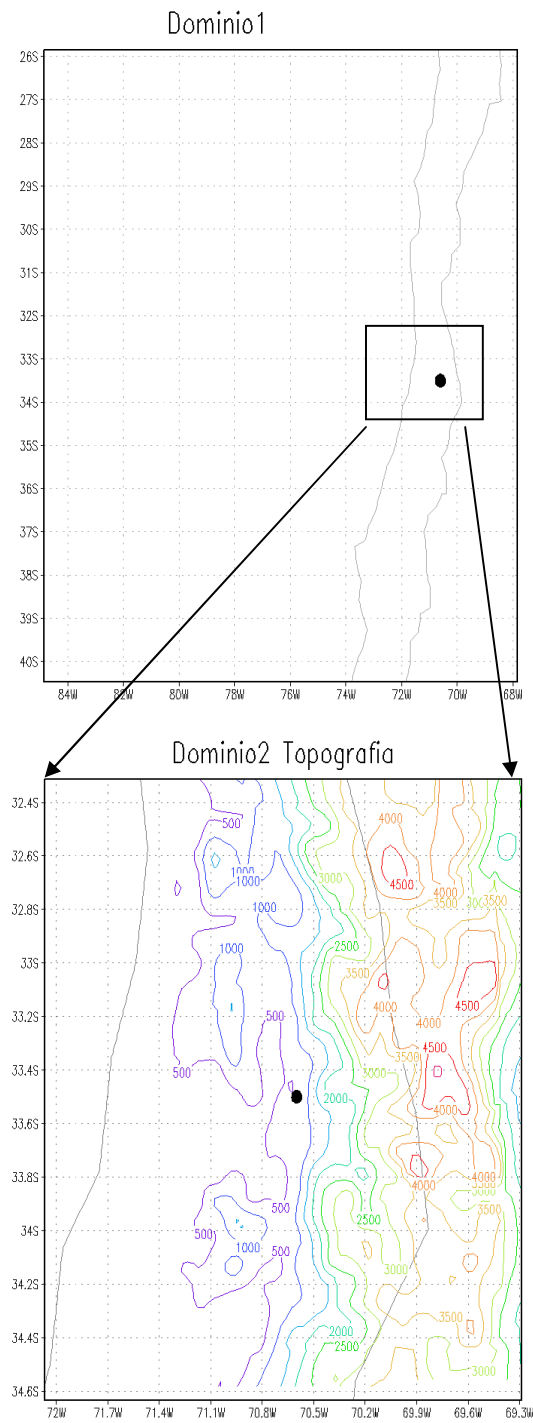


Figura 16. Dominios utilizados en las simulaciones. Dominio inferior incluye topografía vista por el modelo. El punto indica la ubicación aproximada de Santiago.

3.3 Variables meteorológicas y de calidad de aire a evaluar

Para las simulaciones finales, cuyos resultados serán mostrados en el capítulo 4 y 5 de este trabajo, serán evaluadas diversas variables meteorológicas y de calidad de aire.

Uno de los factores importantes en la dispersión de contaminantes es la altura de la capa de mezcla y su variabilidad temporal. Para ello serán analizados los datos de altura de capa de mezcla modelados, los cuales serán comparados con alguno de los escasos datos observados disponibles, como los documentados en Undurraga, 2009.

Las variables meteorológicas que son incluidas en la evaluación de los resultados del modelo son la temperatura y razón de mezcla de vapor de agua superficial. En este punto serán evaluadas la temperatura y razón de mezcla a 2 metros, que son calculadas en el modelo a través de la teoría de la capa superficial de Monin-Obukhov (Monin y Obukhov, 1954), que considera características de la superficie (rugosidad, humedad de suelo, etc) para el cálculo de las variables. Además, también será evaluada la temperatura y humedad obtenida desde el primer nivel vertical del modelo, que tiene una altura representativa de 40 metros (*half level*) sobre la superficie.

En las pruebas de simulación hechas en este trabajo de tesis, se intentó reducir la distancia del primer nivel vertical del modelo, para lograr que éste estuviese a una distancia comparable respecto a otros modelos como WRF-CHEM (16 metros, Schmitz, 2007) y MM5-Polyphemus (20 metros, Alcañiz, comunicación personal). Sin embargo, cuando se intentó hacerlo en CCATT-BRAMS, el modelo se inestabilizó numéricamente y se detuvo la integración, por lo cual necesariamente se tuvo que disminuir la resolución vertical del primer nivel del modelo. Por lo tanto, se debe tener presente esta característica que presenta la configuración de la simulación, en la evaluación de los resultados de las salidas.

También será evaluado el viento, tanto en magnitud como en dirección, lo cual define el transporte o advección de las trazas a estudiar, como el CO, NO_x y el O₃.

Por otro lado, en la simulación de meteorología con dispersión se evaluará el comportamiento de las razones de mezcla de CO, tanto en su variación temporal para las estaciones de la red MACAM, como en el comportamiento espacial (horizontal y vertical). Finalmente, en la corrida con fotoquímica serán evaluadas y/o analizadas las diversas trazas incluidas en la misma, tales

como compuestos orgánicos volátiles (COV), NO_x y O₃; que al igual que para el CO, se estudiará su variabilidad espacial y temporal.

3.4 Método de evaluación de resultados

Los resultados de cada simulación realizada serán comparados con las observaciones disponibles, tanto meteorológicas como de viento y de calidad del aire. Dichas verificaciones permitirán determinar la habilidad del modelo y también los aspectos deficientes en las simulaciones.

El procedimiento de evaluación para todas las variables será el siguiente: teniendo disponibles las series de tiempo observadas y modeladas, se hará en primer lugar una comparación de los ciclos diarios. Para lo cual, se promediará para cada hora del día los valores respectivos; lo mismo será realizado para la desviación estándar.

La comparación entre las medias estará dada por la diferencia entre lo observado y lo modelado, mientras que su significancia estadística será estimada a través del método de bootstrap (Wilks, 1995), que consiste en conseguir una distribución gaussiana a partir de muchas simulaciones aleatorias de diferencia de medias, para cada hora. A su vez, el mismo procedimiento será realizado para estimar la diferencia de desviación estándar y su significancia estadística. Tanto para la media como para la desviación estándar, el intervalo de confianza será del 95%, quedando la significancia en 2 colas (figura 17). En ambos casos, se supone como hipótesis nula para las medias $\mu_{\text{obs}} = \mu_{\text{mod}}$ y para las desviaciones estándar $\sigma_{\text{obs}} = \sigma_{\text{mod}}$. Por lo tanto, si la diferencia observada y modelada cae en las colas, se rechaza la hipótesis y se concluye que las medias o desviaciones estándar observadas y modeladas son estadísticamente diferentes.

Luego de estimada la bondad del modelo para los ciclos diarios de las variables, se hará una comparación de las series de tiempo observadas y modeladas de cada variable, previo a la extracción de este ciclo. A la serie de anomalías resultantes, modelada y observada, se les calculará el error cuadrático medio (RMSE), la desviación estándar y el coeficiente de correlación.

La significancia del coeficiente de correlación de anomalías de cada serie observada y modelada se calculará mediante el método de bootstrap mencionado previamente. Para las correlaciones, se utilizará un intervalo de confianza del 99%, considerando en el test una

significancia de 1%, distribuida en la cola derecha de la función empírica de probabilidad acumulada que se obtenga (figura 18). Se toma como hipótesis nula que $\rho = 0$. Si la correlación obtenida cae en la cola de la distribución, se rechaza la hipótesis nula al 99% de confianza y se concluye que la correlación entre la serie observada y modelada es estadísticamente significativa. En caso contrario, la hipótesis nula se acepta.

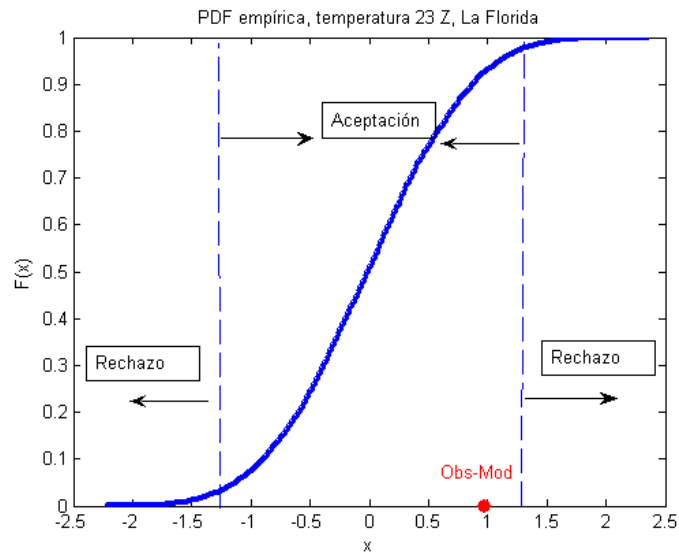


Figura 17. Función de probabilidad acumulada empírica de test bootstrap para diferencias de medias y desviación estándar observada y modelada. Ejemplo para temperatura 2m de las 23Z en La Florida.

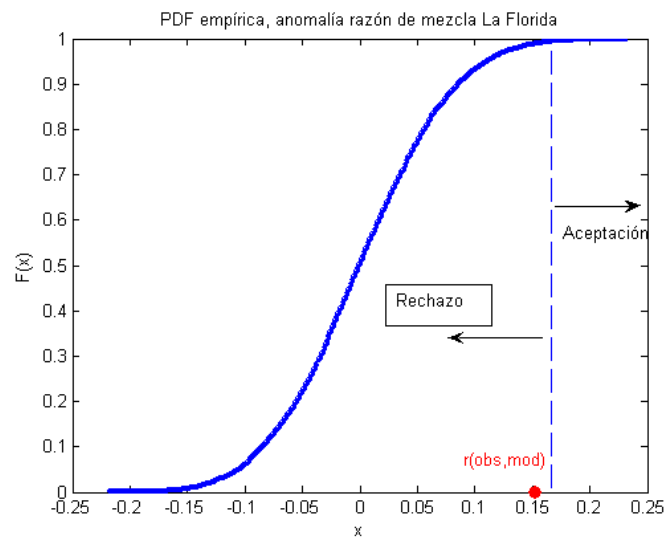


Figura 18. Función de probabilidad acumulada empírica de test bootstrap para significancia de correlación. Ejemplo para correlación de anomalías de razón de mezcla de vapor de agua.

4 Resultado de simulación de variables meteorológicas y dispersión

4.1 Introducción

En este capítulo se mostrarán los resultados de una de las simulaciones definitivas hechas con CCATT-BRAMS, para parte del mes de enero de 2002, usando el modelo sólo en modo meteorología-dispersión. Se estudiará el comportamiento del mismo respecto de los flujos superficiales de energía (calor sensible y latente), evolución de la altura de capa límite planetaria; temperatura, razón de mezcla de vapor de agua y viento superficial, además de razones de mezcla de CO, lo cual servirá para evaluar las condiciones simuladas de dispersión de trazas en la zona. Estas corridas fueron realizadas con datos de condiciones iniciales y de borde meteorológicas extraídas del modelo CPTEC.

4.2 Flujos superficiales de calor latente, sensible y altura de capa límite

Dado que en la sensibilidad mostrada en la sección 2.4 y 2.5 fueron utilizados reanálisis NCEP, se considera oportuno mostrar nuevamente los flujos de calor sensible y latente obtenidos, pero ahora usando datos de reanálisis CPTEC. Idealmente la sensibilidad descrita en la sección 2.4 y 2.5 debió haber sido realizada con los reanálisis CPTEC (con los cuales se harían las simulaciones finales). Sin embargo, en el momento que fueron hechas dichas pruebas, no se contó con dichos datos, los cuales sí pudieron ser utilizados para las pruebas definitivas. Respecto a los resultados que se mostrarán en la figura 19 y 20, cabe mencionar que al no disponer prácticamente con datos observados de estas variables, se hace difícil hacer una verificación objetiva de las mismas, por lo cual se utilizarán principalmente consideraciones teóricas y algunos de los escasos datos disponibles.

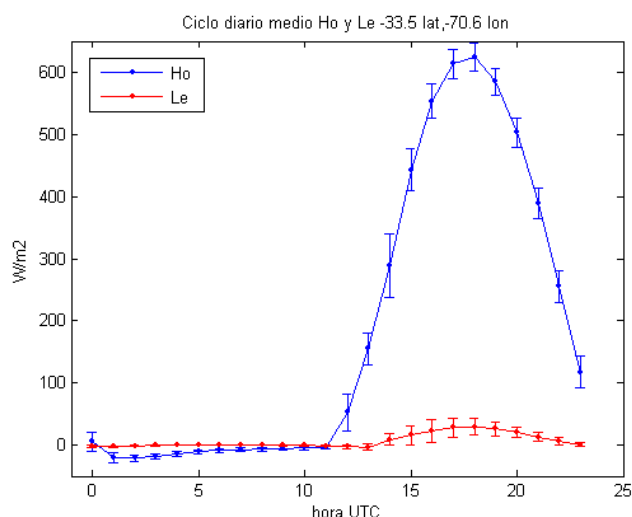


Figura 19. Ciclo diario medio de calor sensible y calor latente simulado por CCATT-BRAMS, para punto ubicado en -33.5 latitud y -70.6 longitud.

La figura 19 muestra el ciclo diario promedio de calor sensible y latente para un punto que representa aproximadamente la ciudad de Santiago. Se observa que durante el día los flujos de calor sensible presentan mayor magnitud que los de calor latente, lo cual parece razonable, ya que las condiciones superficiales diurnas de verano en Santiago presentan altos valores de temperatura y bajos valores de humedad. Entorno al máximo de cada curva, la razón de Bowen, que es la proporción entre el calor sensible ($\sim 600 \text{ W/m}^2$) y latente ($\sim 30 \text{ W/m}^2$), alcanza un valor aproximado de 20.

Si comparamos este valor modelado con otros observados para condiciones urbanas, éste parece estar sobrestimado respecto a lo encontrado en la literatura, en particular para condiciones estivales. Por ejemplo en Coutts *et al* (2006), se estudiaron los flujos de energía en la ciudad de Melbourne, Australia, donde fueron encontradas máximos diarios de razones de Bowen entorno a 5; por otro lado en Kalanda *et al* (1980), se realizó un estudio similar para la zona urbana de Vancouver, Canadá, donde se midieron valores máximos diarios de razón de Bowen de 6.

Esta probable sobrestimación del calor sensible sobre el latente, en especial durante el día, mostrada en la figura 19, podría traer consecuencias en la estimación de otras variables meteorológicas como la temperatura y la humedad superficial, entre otras. Una de las causas posibles de esta discrepancia puede deberse al aún no ajustado valor de humedad inicial de suelo usado en la simulación, para datos reanalizados CPTec, lo cual producirá efectos sobre los flujos de calor sensible y latente, tal como fue mostrado en la sección 2.4.3 de este trabajo.

Vale la pena reiterar que para las pruebas de sensibilidad realizadas con la humedad de suelo en dicha sección, fueron utilizados datos reanalizados NCEP, lo cual no fue posible de replicar con los reanálisis CPTEC. Por lo tanto y en el marco de la implementación operativa del modelo en Chile, una de las tareas pendientes será llevar a cabo pruebas de sensibilidad, como las realizadas en la sección 2, pero para los datos de entrada CPTEC.

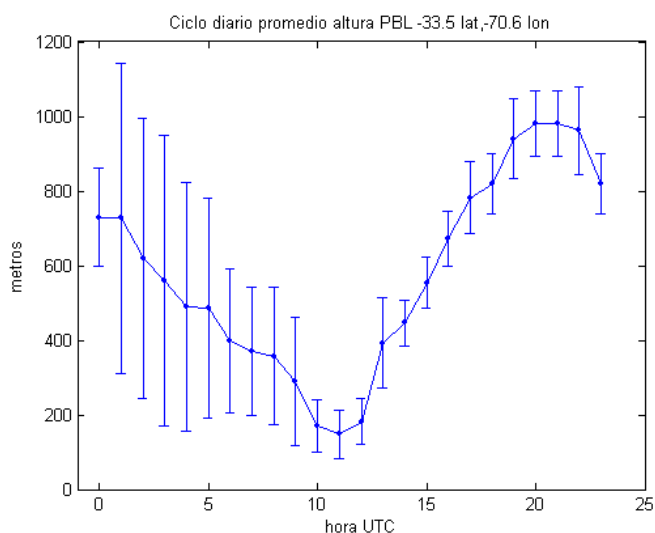


Figura 20. Ciclo diario medio de altura de capa límite para CCATT-BRAMS.

Respecto al comportamiento de la altura de la capa de mezcla (PBL), la figura 20 muestra el ciclo diario obtenido por CCATT-BRAMS. La opción de parametrización de mezcla turbulenta utilizada en esta corrida considera la deformación anisotrópica, usando el esquema propuesto por Smagorinsky, 1963, para obtener los coeficientes de mezcla vertical. Por su parte, los coeficientes de mezcla horizontales son también calculados por un esquema de deformación.

Los resultados mostrados en la figura 20 muestran que la magnitud del máximo promedio está entorno a los 1000 metros, lo cual sucede alrededor de las 17 horas local. En la parte creciente del ciclo diario de altura de capa límite, se aprecia que la variabilidad horaria es menor, entorno a un 10% del valor promedio, lo que muestra un comportamiento consistente del modelo en la estimación diaria, probablemente debida a la poca variabilidad sinóptica presente en el periodo. El crecimiento de la PBL en CCATT-BRAMS se inicia después de las 9 horas local, probablemente algo tardía respecto a lo observado en otros modelos de mesoescala corridos para la zona central como MM5-DMC y HIRLAM, en los cuales el crecimiento de la PBL comenzaba al menos un par de horas antes que en CCATT-BRAMS (no mostrado). En la figura 20 se observa también que el valor mínimo es de aproximadamente 150 metros, lo cual indica que en la noche la capa límite no colapsa (no se hace cero).

El decrecimiento de la PBL, después de alcanzar su máximo, muestra una disminución gradual, aunque se observa una alta variabilidad horaria en este periodo, con magnitudes comparables a la de los valores medios.

Una de las pocas comparaciones posibles con datos observados de altura de capa de mezcla es posible encontrarlo en el trabajo de tesis de Undurraga, 2009, donde es estimada la PBL en base al nefobasímetro del departamento de Geofísica de la Universidad de Chile. La observación de altura de capa de mezcla, proveniente de este trabajo, para las 14 horas local es de 737 (m) de altura \pm 175 (m), valor que resulta ser comparable al valor medio estimado en CCATT-BRAMS para esa misma hora, que es de aproximadamente 780 (m).

4.3 Evaluación de temperaturas

4.3.1 Ciclo diario

En primer lugar serán mostrados los resultados de los ciclos diarios observados y modelados. La estadística es hecha para los 10 días de la simulación considerados en el estudio. Para el despliegue de la información y análisis, se tomará una estación para las siguientes zonas geográficas consideradas de interés: área urbana de Santiago, estaciones ubicadas al oeste y/o sur de la zona urbana (llamadas desde ahora rurales), que presentan esas características, y estaciones en altura, en particular Lo Prado y La Dormida. Para cada estación se desplegará la estimación de temperatura a 2 metros (t2m) y desde el primer nivel del modelo (tz1). En el anexo 3 se adjuntarán los ciclos diarios para el resto de las estaciones analizadas.

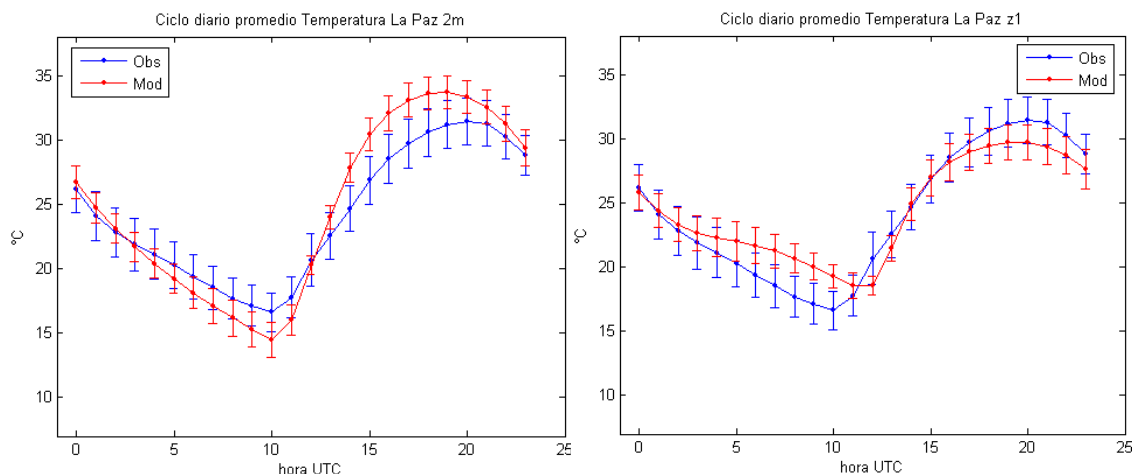


Figura 21. Ciclo diario medio de temperaturas, t2m y tz1, estación de La Paz, perteneciente a la zona urbana.

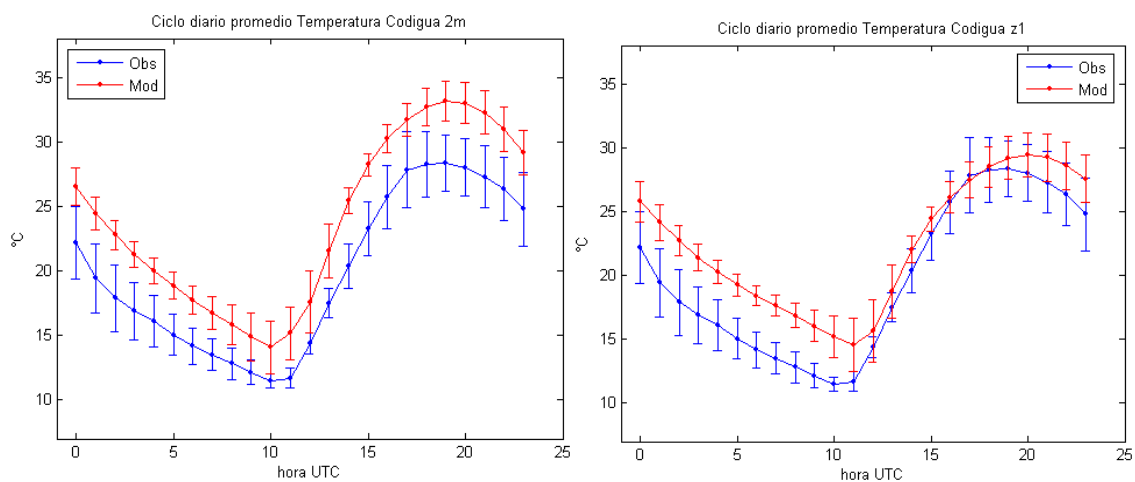


Figura 22. Ciclo diario medio de temperaturas, t2m y tz1, estación de Codigua, de la zona rural.

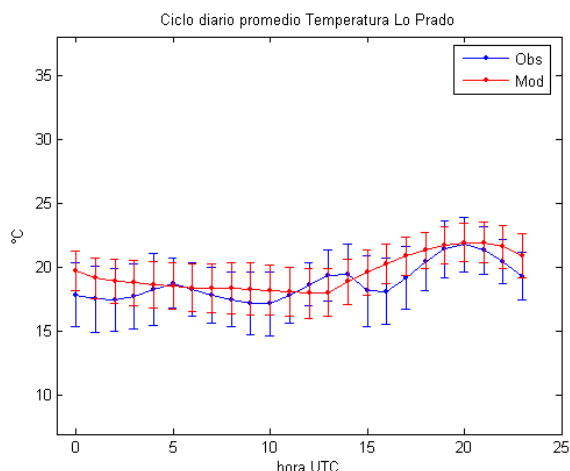


Figura 23. Ciclo diario medio de temperaturas, tz1, estación de Lo Prado, de altura.

Para las estaciones ubicadas en la zona urbana, como el caso de La Paz (figura 21), la t2m del modelo sobrestima la parte cálida del ciclo y subestima la parte fría del mismo. Por el contrario, la tz1 del modelo produce sobrestimación en la parte fría del ciclo y subestimación en la parte cálida del mismo.

En general, las comparaciones para las otras estaciones del área urbana observan un comportamiento similar (Anexo 3). Es posible que la simulación de t2m sobrestime la amplitud térmica debido a que las condiciones de suelo (humedad) aún no han sido completamente ajustadas en el modelo. Por su parte, el ciclo diario de tz1 suaviza sus extremos (menor amplitud térmica que la observada), probablemente producto de la altura a la que está ubicado el primer nivel del modelo (40 metros).

Analizando los resultados para Codigua (figura 22), representativa de las estaciones ubicadas al occidente del área urbana de Santiago, es evidente la sobrestimación de la t2m simulada durante todo el ciclo. En general, las otras estaciones de esta zona muestran el mismo comportamiento. Por su parte, el ciclo térmico medio proveniente de tz1 también muestra sobrestimación, pero en magnitud ésta es menor a la de t2m.

Finalmente, observando los ciclos diarios de las estaciones de altura, como Lo Prado (figura 23), se puede ver que el modelo simula la temperatura entorno a los observado, haciendo notar que el ciclo no tiene la forma típica de las estaciones afectadas por efectos superficiales, por ende, no presentan un marcado ciclo enfriamiento/calentamiento diurno, sino que más bien representaría el ciclo sinóptico, dada la altitud que presenta (1065 msnm). Como se mencionó,

para Lo Prado (al igual que La Dormida) los datos modelados no fueron extraídos del nivel superficial, a causa de la diferencia de altitud entre el modelo y lo observado, sino que del nivel vertical más próximo a la altitud observada.

La sobrestimación, que en general presenta el modelo de las temperaturas, puede deberse al aún inadecuado ajuste de un valor de inicialización de la humedad de suelo, presente en la configuración del mismo. En las simulaciones previas se hizo un importante trabajo de sensibilidad al respecto, sin embargo ha sido difícil encontrar un valor apropiado. Por otro lado, podrían obtenerse mejores resultados del primer nivel del modelo si este estuviese más cerca del suelo, sin embargo, no pudo reducirse el espaciado de grilla del primer nivel, por problemas de inestabilidad numérica mencionados previamente.

Para determinar estadísticamente el grado de similitud de los valores medios modelados y observados, se presentan a continuación los resultados de los test de bootstrap para cada hora del ciclo diario. La tabla 8 resume los resultados, que serán mostrados en forma cualitativa, esto es, se acepta (medias similares estadísticamente) o rechaza (medias distintas) la hipótesis nula.

Tabla 8. Resultados cualitativos del test bootstrap para diferencia de medias t2m.

| Hora UTC | Entel | La Platina | Chada | Codigua | Mallarauco | El Manzano | La Reina | El Paico | Pudahuel | La Paz | La Florida |
|----------|---------|------------|---------|---------|------------|------------|----------|----------|----------|---------|------------|
| 0 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 1 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 2 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta |
| 3 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 4 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 5 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza |
| 6 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza |
| 7 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 8 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 9 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 10 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 11 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 12 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza |
| 13 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 14 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 15 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 16 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 17 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 18 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 19 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 20 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 21 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 22 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 23 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |

La tabla 8 muestra que para t2m, que la mayoría de las medias son rechazadas por el test (70%). Por otra parte, de las horas en que se acepta el test, la mayoría corresponde a la parte fría del ciclo diario, mientras que las horas del ciclo cálido son en su mayoría rechazadas. Hay estaciones en que prácticamente todas las horas son rechazadas, como Entel, La Platina, Codigua, El Paico y Pudahuel. Esta falla sistemática podría corregirse restando un valor constante a las series modeladas, con lo cual los resultados del test bootstrap mejorarían considerablemente. Sin embargo, debe aspirarse a conseguir esta “resta” físicamente en el modelo como, por ejemplo, mejorando la configuración del modelo, en particular el factor de humedad inicial de suelo.

Respecto a los resultados del test de significancia para la desviación estándar, en el 94% de las horas la hipótesis es aceptada para t2m, lo cual indica que la variabilidad es bien capturada por el modelo.

Tabla 9. Resultados cualitativos del test bootstrap para diferencia de medias tz1.

| Hora UTC | Entel | La Platina | Chada | Codigua | La Dormida | Lo Prado | Mallarauco | El Manzano | La Reina | El Paico | Pudahuel | La Paz | La Florida |
|----------|---------|------------|---------|---------|------------|----------|------------|------------|----------|----------|----------|---------|------------|
| 0 | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 1 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta |
| 2 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta |
| 3 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 4 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 5 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 6 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 7 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 8 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 9 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 10 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 11 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza |
| 12 | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 13 | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza |
| 14 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 15 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 16 | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza |
| 17 | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 18 | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza |
| 19 | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 20 | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 21 | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 22 | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 23 | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza |

El test para tz1 (tabla 9) es aceptado para el 37% de las horas, siendo mejor el resultado que para t2m. El ciclo cálido en tz1 es mejor representado respecto a la estimación t2m, mientras que, por el contrario, en la parte fría del mismo el rechazo es alto. Finalmente, al igual que para t2m, la desviación estándar observada y modelada de tz1 puede considerarse estadísticamente no diferenciable, para prácticamente todas las estaciones y horas del ciclo.

Pareciera ser que para muchas estaciones se podrían obtener valores modelados cercanos a los observados promediando t2m y tz1, lo cual podría ser útil si no se logra mejorar la estimación de t2m vía ajuste de la humedad de suelo.

4.3.2 Variabilidad interdiaria

Ahora se analizarán las series de tiempo de anomalías; donde, al igual que en el análisis del ciclo diario, se mostrarán los resultados de estaciones representativas de cada zona geográfica (urbana, rural y de altura) y para t2m y tz1. El gráfico del resto de las estaciones se encuentra en el anexo 4.

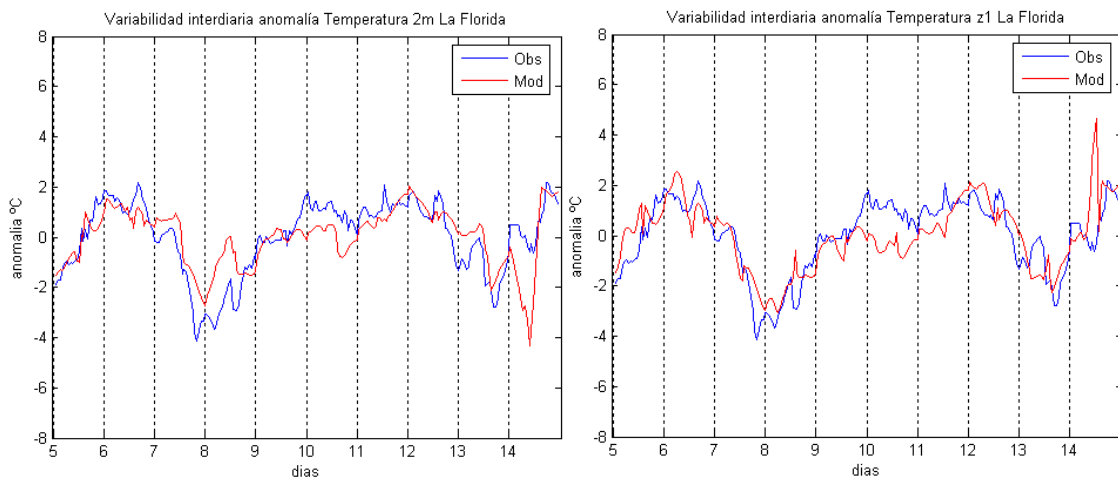


Figura 24. Anomalías de temperaturas, La Florida, estación urbana.

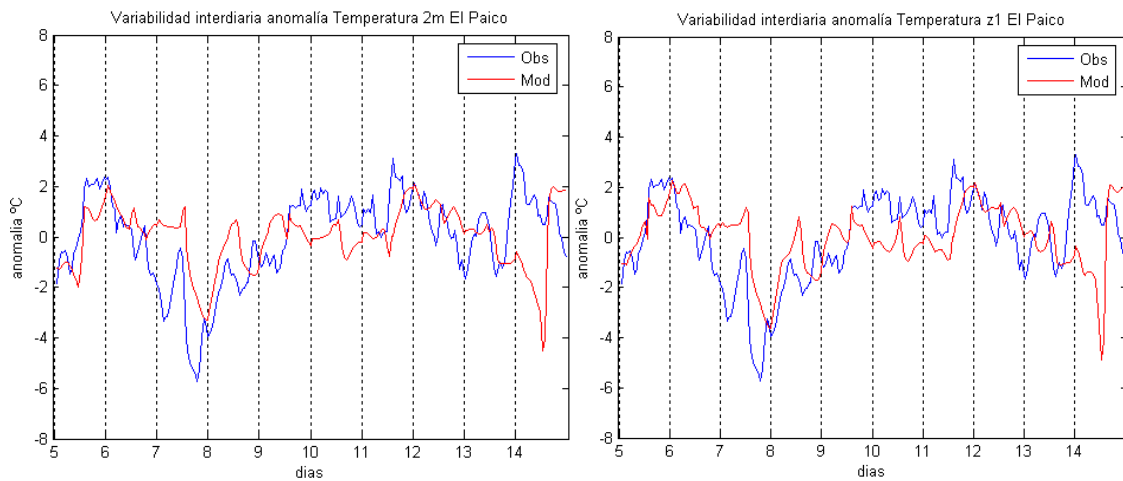


Figura 25. Anomalías de temperaturas, El Paico, de la zona rural.

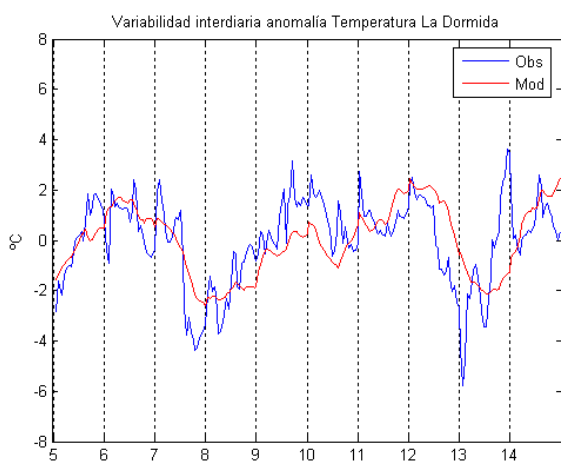


Figura 26. Anomalías de temperaturas, La Dormida, estación de altura.

Una mirada general a las series de tiempo de anomalías de temperaturas permite apreciar que la variabilidad sinóptica es bien capturada por el modelo (figura 24, 25 y 26). También se observa que las anomalías de t2m y tz1 no presentan mucha diferencia entre sí.

Observando ahora por estaciones, en El Paico (figura 25), entre el día 13 y 14 el modelo simula una anomalía térmica negativa de 5 grados, probablemente producto del paso de una perturbación sinóptica de onda corta, descrita con mayor detalle en el anexo 2. Sin embargo, la serie de datos observados muestra una anomalía positiva de casi 4 grados.

Se evaluó la significancia estadística de los coeficientes de correlación, la cual viene resumida en la tabla 10. En todas las estaciones se rechaza la hipótesis nula, esto es $\rho = 0$, por lo tanto las correlaciones son estadísticamente significativas en todas las estaciones y relevantes para gran parte de ellas, ya que representan una buena parte de la varianza total.

En resumen, se puede decir estadísticamente que los resultados de la implementación de CCATT-BRAMS sobre Chile representan la variabilidad sinóptica en el periodo simulado.

Tabla 10. Resultados cualitativos del test bootstrap para significancia de correlación anomalías t2m y tz1.

| | Coef. corr t2m | | | Coef. corr tz1 | | |
|------------|----------------|---------|--|----------------|------|---------|
| Entel | 0,60 | Rechaza | | Entel | 0,81 | Rechaza |
| La Platina | 0,69 | Rechaza | | La Platina | 0,69 | Rechaza |
| Chada | 0,19 | Rechaza | | Chada | 0,52 | Rechaza |
| Codigua | 0,25 | Rechaza | | Codigua | 0,39 | Rechaza |
| La Dormida | | | | La Dormida | 0,60 | Rechaza |
| Lo Prado | | | | Lo Prado | 0,79 | Rechaza |
| Mallarauco | 0,57 | Rechaza | | Mallarauco | 0,60 | Rechaza |
| El Manzano | 0,55 | Rechaza | | El Manzano | 0,74 | Rechaza |
| La Reina | 0,44 | Rechaza | | La Reina | 0,70 | Rechaza |
| El Paico | 0,38 | Rechaza | | El Paico | 0,41 | Rechaza |
| SCEL | 0,62 | Rechaza | | SCEL | 0,70 | Rechaza |
| La Paz | 0,68 | Rechaza | | La Paz | 0,82 | Rechaza |
| La Florida | 0,72 | Rechaza | | La Florida | 0,74 | Rechaza |

4.4 Evaluación de razón de mezcla de vapor de agua

4.4.1 Ciclo diario

Se evaluarán primeramente los ciclos diarios medios de la humedad, donde se elegirán estaciones, al igual que para la temperatura, que sean una muestra de condiciones urbanas, de la zona rural y de altura. Para cada estación se desplegará las estimaciones de razón de mezcla a 2 metros (w2m) y del primer nivel del modelo (wz1). El resto de las estaciones se adjunta en el anexo 5.

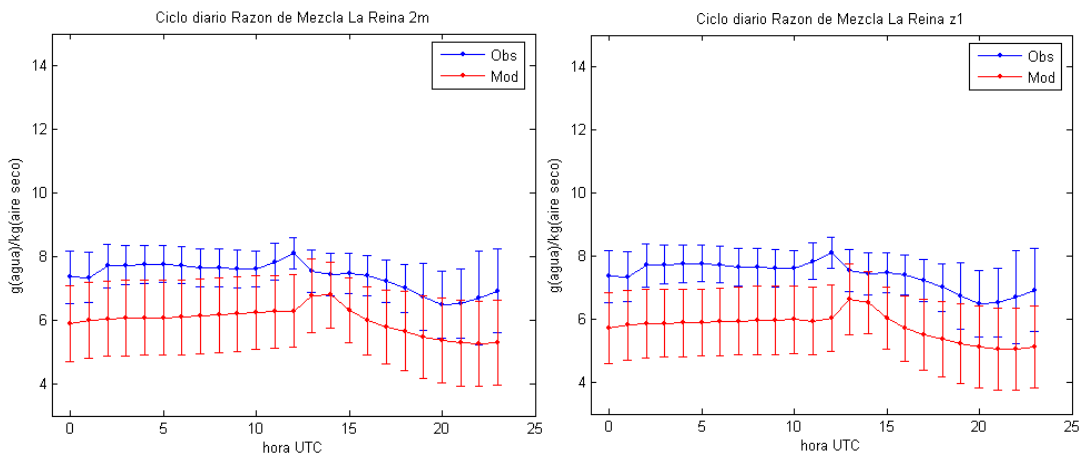


Figura 27. Ciclo diario medio razón de mezcla de vapor de agua, La Reina, estación urbana.

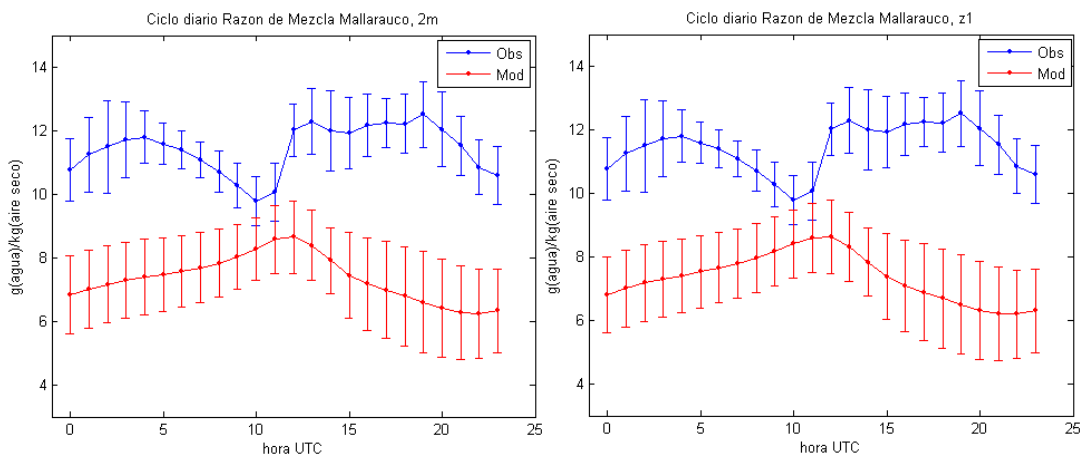


Figura 28. Ciclo diario medio razón de mezcla de vapor de agua, La Reina, de la zona rural.

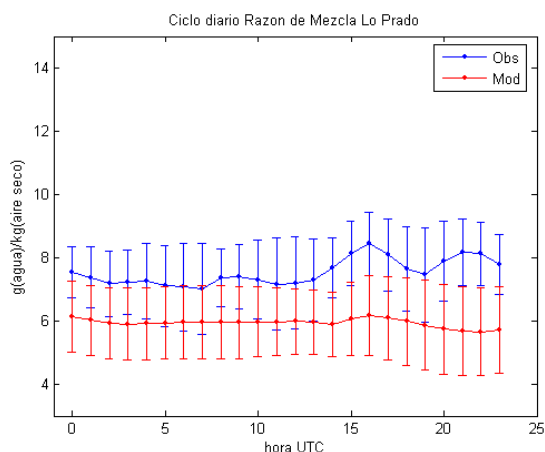


Figura 29. Ciclo diario medio razón de mezcla de vapor de agua, Lo Prado, estación de altura.

Las estaciones urbanas, representadas en La Reina (figura 27), muestran una subestimación sistemática de la humedad en todo su ciclo diario. Este comportamiento también se observa en La Paz, la Florida y en menor medida en Pudahuel (Anexo 5). Como se aprecia, la variabilidad diaria, tanto observada como modelada, es más bien plana en el área urbana.

Para las estaciones rurales, como Mallarauco (figura 28), el modelo también subestima la humedad, aunque en mayor magnitud que para las urbanas. Mallarauco presenta un claro ciclo diario observado, con un aumento de la humedad en la tarde, producto del viento predominante del oeste que transporta humedad desde la costa (ver ciclo del viento Mallarauco, Anexo 7). Sin embargo, el modelo no es capaz de simular este rasgo, sino que por el contrario, durante la tarde calcula un descenso en la humedad.

En las estaciones de altura, como Lo Prado (figura 29), también se modela la humedad en forma subestimada, teniendo esta diferencia observación-modelo una magnitud comparable al caso urbano, incluso la forma del ciclo es similar.

En resumen, se aprecia una subestimación general de la humedad por el modelo, algo que se dedujo desde el análisis del balance de flujos superficiales hecho en la sección 2.4.3. Además, no se observa una diferencia importante entre la estimación modelada de la humedad entre w_{2m} y w_{z1} .

Tabla 11. Resultados cualitativos del test bootstrap para diferencia de medias $w2m$.

| hora | Mallarauco | El Manzano | La Reina | El Paico | Pudahuel | La Paz | La Florida |
|------|------------|------------|----------|----------|----------|---------|------------|
| 0 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 1 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 2 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 3 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 4 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 5 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 6 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 7 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 8 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 9 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 10 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 11 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 12 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 13 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza |
| 14 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza |
| 15 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 16 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 17 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 18 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 19 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 20 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 21 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 22 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 23 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |

En los test de bootstrap aplicados para $w2m$ (tabla 11) y $wz1$ (no mostrado), sólo en el 16% y 11% de las horas se acepta la hipótesis nula, respectivamente. Por el contrario, la desviación estándar, tanto para $w2m$ como para $wz1$, se acepta la hipótesis nula en el 100% de las horas. Esto quiere decir que si bien, la variabilidad está siendo capturada por el modelo sin problemas, dada la subestimación sistemática de la humedad media modelada se está rechazando el test. Si se corrigiera esta subestimación de los resultados de humedad media por un valor constante, probablemente el test de bootstrap aceptaría un gran porcentaje de las horas. Sin embargo, esto debe hacerse ajustando la configuración física del modelo.

4.4.2 Variabilidad interdiaria

Ahora se muestran las series de tiempo de anomalías de humedad, de igual modo, para una estación de la ciudad, una de la zona rural y una de altura. Será mostrada la anomalía tanto de $w2m$ como de $wz1$. El resto de las estaciones está en el anexo 6.

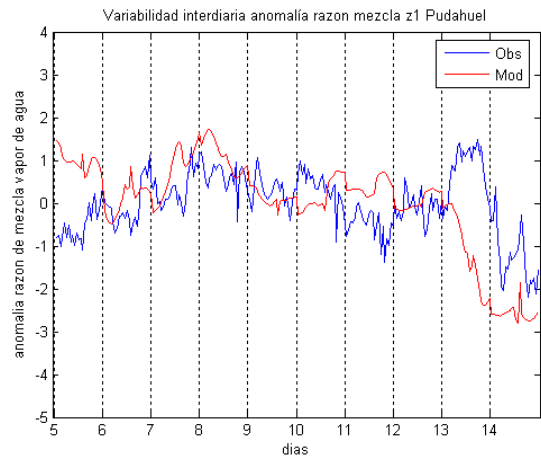
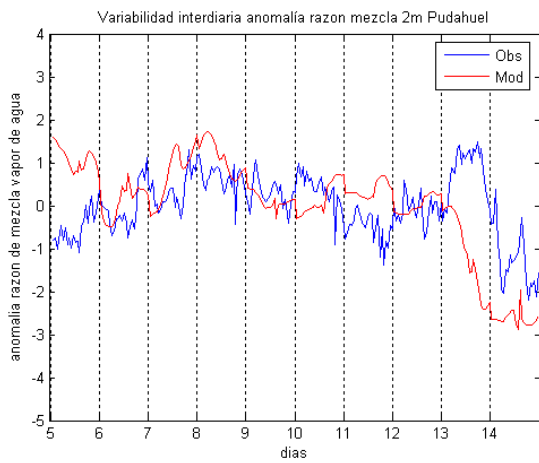


Figura 30. Anomalías de razón de mezcla de vapor de agua, Pudahuel, estación urbana.

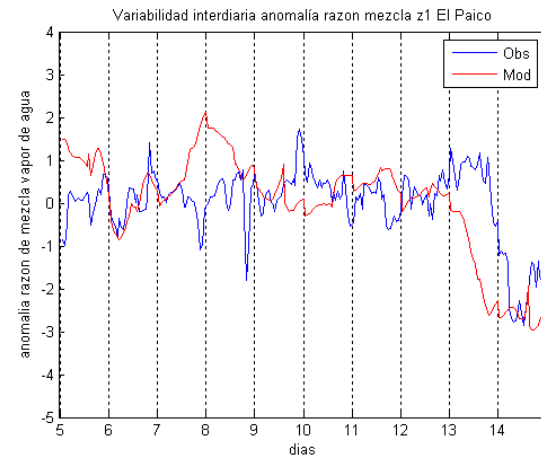
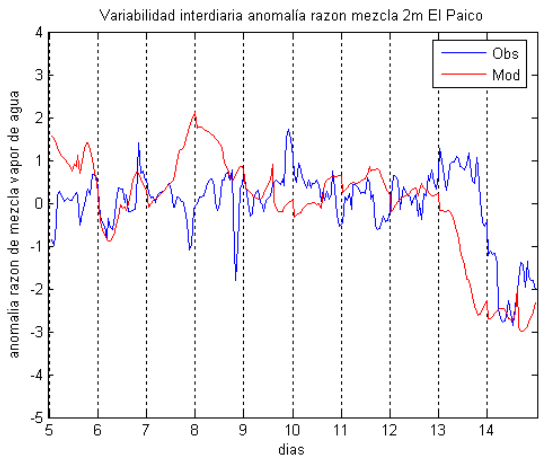


Figura 31. Anomalías de razón de mezcla de vapor de agua, El Paico, estación de la zona rural.

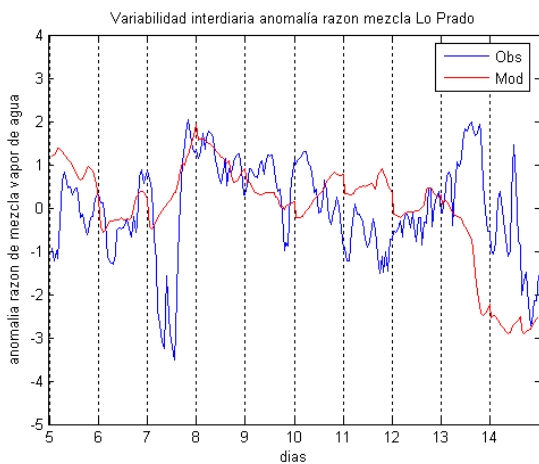


Figura 32. Anomalías de razón de mezcla de vapor de agua, Lo Prado, estación de altura.

Para las estaciones urbanas, representadas en Pudahuel (figura 30), los resultados modelados muestran un comportamiento entorno a lo observado, aunque en esta última serie se aprecian variaciones de alta frecuencia que no son capturadas por el modelo. Al final del periodo es simulada la presencia de anomalías negativas en la humedad, producto de la irrupción de aire frío.

En las estaciones de la zona rural (figura 31) se observan características similares a las descritas en las estaciones urbanas, aunque entre el día 7 y 8 CCATT-BRAMS simula anomalías positivas en El Paico, que no son apreciadas en la serie observada.

Finalmente, para las estaciones de altura como Lo Prado (figura 32), el modelo es capaz de representar el comportamiento sinóptico de la humedad, aunque se observan discrepancias importantes, entre lo modelado y observado el día 7 (anomalías negativas no simuladas) y al final del periodo, donde a pesar que el modelo es capaz de representar la tendencia general de descenso de las anomalías, no lo hace con máximos observados el día 13 y 14, los cuales probablemente sean debidos a advecciones de humedad desde la zona costera.

Tabla 12. Resultados cualitativos del test bootstrap para significancia de correlación anomalías w2m y wz1.

| | Coef. corr w2m | | | Coef. corr wz1 | |
|------------|----------------|---------|------------|----------------|---------|
| La Dormida | | | La Dormida | 0,16 | Rechaza |
| Lo Prado | | | Lo Prado | 0,27 | Rechaza |
| Mallarauco | 0,46 | Rechaza | Mallarauco | 0,45 | Rechaza |
| El Manzano | 0,21 | Rechaza | El Manzano | 0,32 | Rechaza |
| La Reina | 0,04 | Acepta | La Reina | 0,09 | Acepta |
| El Paico | 0,48 | Rechaza | El Paico | 0,48 | Rechaza |
| SCEL | 0,32 | Rechaza | SCEL | 0,32 | Rechaza |
| La Paz | 0,30 | Rechaza | La Paz | 0,29 | Rechaza |
| La Florida | 0,15 | Acepta | La Florida | 0,16 | Rechaza |

La tabla 12 muestra los resultados del test de significancia estadística de los coeficientes de correlación obtenidos, por la técnica de bootstrap. El test rechaza la hipótesis nula en la gran mayoría de las estaciones, lo que significa que las correlaciones de las anomalías de humedad observadas y modeladas son estadísticamente significativas con un 99% de confianza. Nuevamente se aprecia que para la humedad no existe mucha diferencia entre los resultados de w2m y wz1.

4.5 Resultado de simulación para el viento

4.5.1 Evaluación cualitativa del viento, vectores

En primer lugar serán mostrados los resultados de los ciclos diarios observados y modelados del vector viento. El ciclo medio es hecho con los 10 días de la simulación considerados en el estudio. En este caso, el viento es extraído en el modelo desde el primer nivel. Como se ha hecho para las otras variables, se tomará una estación para el área urbana de Santiago, la zona rural y estaciones en altura. El resto de las estaciones está en el anexo 6.

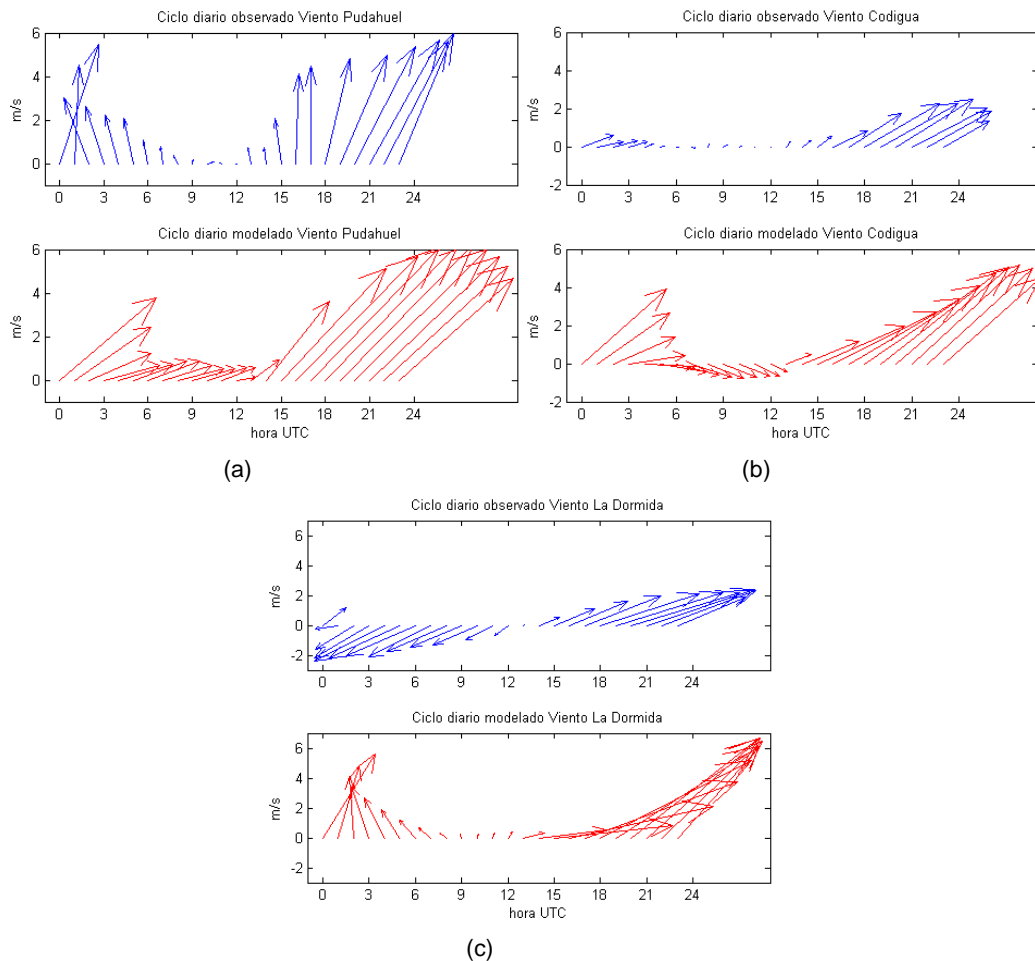


Figura 33. Ciclo diario medio del vector viento, observado y modelado para las estaciones de Pudahuel (a), Codigua (b) y La Dormida (c).

En la figura 33-a se muestra el ciclo diario del vector viento de Pudahuel, estación ubicada en la zona urbana. En líneas generales la variación de la dirección e intensidad está bien

determinada por el modelo, observándose la magnitud del viento disminuyendo en horas de la noche y madrugada, mientras que en la tarde ésta aumenta con dirección predominante del sur.

Para las estaciones ubicadas en la zona rural, como Codigua (figura 33-b), se observa que el modelo en general puede representar la variación diaria de la magnitud, la cual es similar a la descrita para la estación de Pudahuel. Discrepancias son apreciadas en horas de la tarde y noche, ya que el modelo sobrestima la magnitud del viento.

Finalmente la figura 33-c muestra los resultados para una estación de altura, como La Dormida. A pesar que se logra modelar la disminución de la magnitud en horas de la madrugada y el aumento en horas de la tarde, existe una discrepancia en la dirección en horas de la madrugada, además se observa una sobrestimación de la magnitud en el modelo en horas de la tarde.

En general el modelo es capaz de representar la variabilidad del vector viento en el ciclo diario, lo cual es importante en orden a simular adecuadamente el transporte de las trazas involucradas en las corridas. Sin embargo, cualitativamente se observa una sobrestimación del viento en las estaciones de la figura 33. Esto podría deberse a que el valor del modelo fue extraído del primer nivel del mismo, el cual está centrado a 40 metros, pero es representativo del espesor entre 0 y 80 metros. Por lo tanto, los efectos de fricción del terreno pueden quedar subestimados, dada la gruesa estimación que se hace si se considera como viento superficial el del primer nivel. Se mencionó anteriormente la imposibilidad de aumentar la resolución vertical del primer nivel por un problema de inestabilidad numérica, factor que de ser solucionado probablemente ayudaría a que el primer nivel del modelo sea más representativo del viento superficial.

4.5.2 Evaluación estadística de la magnitud

Las evaluaciones cuantitativas del viento son hechas con la variable a 10 metros de altura, que considera los ajustes por la superficie de Monin-Obukhov. Sin embargo, el post-proceso del modelo sólo considera como variable de salida la magnitud en la dirección zonal y meridional, por eso para comparar la dirección se usó el primer nivel del modelo (el más cercano a superficie), lo cual fue hecho en forma cualitativa en la sección anterior.

Ahora se mostrará los resultados del ciclo diario de la magnitud del viento superficial, la cual es considerada como el viento a 10 metros de altura. No será hecha la comparación para las estaciones de altura de Lo Prado, El Manzano y La Dormida, para las cuales se extrajo el valor desde el nivel del modelo correspondiente a su altitud. El resto de las estaciones está en el anexo 7.

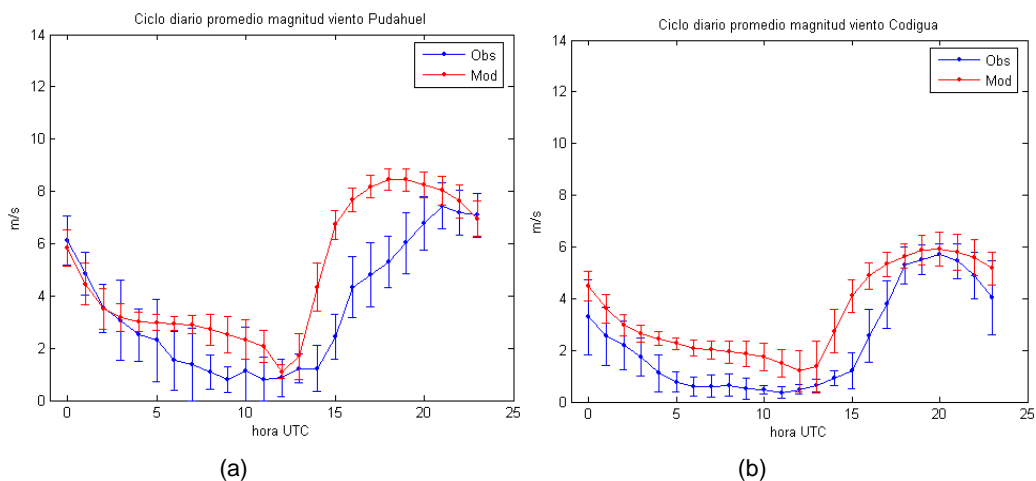


Figura 34. Ciclo diario medio de magnitud del viento, Pudahuel (a) y Codigua (b).

La forma del ciclo de la magnitud del viento en la estación de Pudahuel (zona urbana figura 34-a) en general logra ser representada por el modelo, aunque la magnitud es sobrestimada por la simulación en todo el periodo, excepto en horas de la madrugada, donde lo modelado es prácticamente similar a lo observado. Un comportamiento similar entre lo modelado y observado se aprecia para la estación de Codigua (figura 34-b), representativa de la zona rural.

La evaluación estadística del ciclo diario de la magnitud media del viento, es resumida en la tabla 13, que muestra los resultados de los test de significancia estadística aplicados.

Tabla 13. Resultados cualitativos del test bootstrap para diferencia de medias de magnitud del viento 10m.

| hora | Entel | La Platina | Chada | Codigua | Mallarauco | La Reina | El Paico | Pudahuel |
|------|---------|------------|---------|---------|------------|----------|----------|----------|
| 0 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 1 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 2 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 3 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 4 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 5 | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 6 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 7 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 8 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 9 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 10 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 11 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza |
| 12 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 13 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta |
| 14 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 15 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 16 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 17 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza |
| 18 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza |
| 19 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 20 | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 21 | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 22 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 23 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |

El test bootstrap acepta la hipótesis nula en el 18% de las horas, el restante es rechazado, lo cual indica que para la mayoría de las horas las medias observadas y modeladas son estadísticamente diferenciables. El rechazo principalmente está dado por la sobrestimación del viento modelado, lo cual podría ser explicado a su vez por la sobrestimación de la temperatura en el modelo, que produciría calentamientos locales mayores, gradientes de presión sobrestimados y por ende un mayor transporte local.

4.5.3 Variabilidad interdiaria de la magnitud

Por otra parte, analizando las series de tiempo de la anomalía de la magnitud del viento (figura 35), se observa que prácticamente toda la variabilidad de la misma esta dada por el ciclo diario en las estaciones urbanas (figura 35-a) y de la zona rural (figura 35-b), ya que las series filtradas prácticamente no presentan fluctuaciones importantes. Las únicas estaciones que presentan un ciclo de alta frecuencia, distinto al diario, son las de altura, como Lo Prado y la Dormida (figura 35-c), aunque el modelo no muestra habilidad en representarlo. Por lo tanto, en

una mirada general de la figura 35, no se considera necesario hacer la estadística con las anomalías resultantes de la extracción del ciclo diario a la serie original, producto que la mayor variabilidad de la serie está contenida en los ciclos diarios ya analizados.

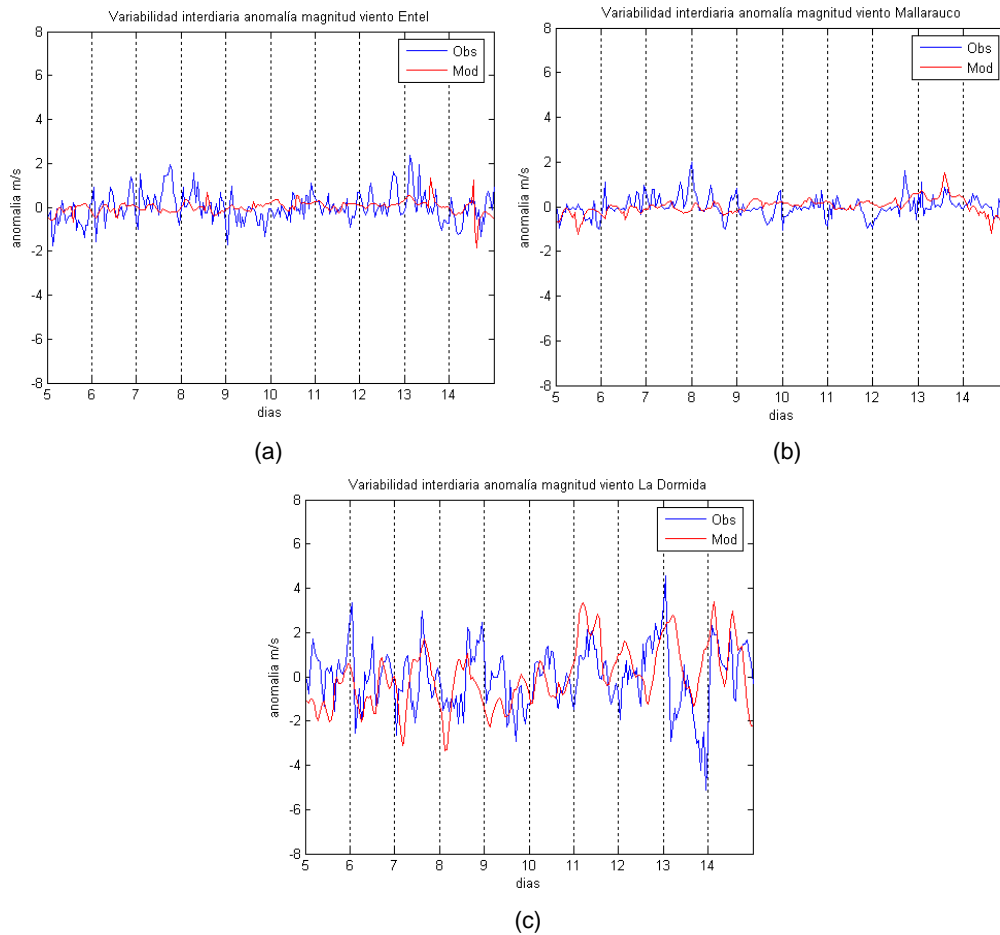


Figura 35. Anomalía de magnitud del viento en estación urbana Entel (a), rural Mallarauco (b) y de altura La Dormida (c).

4.6 Conclusiones generales de la evaluación de variables meteorológicas

- En la fase diurna del ciclo diario, el modelo muestra un predominio del calor sensible sobre el calor latente, lo cual es razonable dada las condiciones superficiales diurnas de verano presentes en Santiago, donde se observan altos valores de temperatura y bajo contenido de vapor de agua. Sin embargo, para un punto de grilla representativo de la ciudad de Santiago, existe una aparente sobrestimación en la magnitud del calor sensible y una subestimación en la de calor latente en el modelo, en especial entorno a los máximos diarios de cada curva. Esta suposición se hace en función de los valores

empíricos de razón de Bowen obtenidos en otros experimentos para zonas urbanas en verano, en las cuales se estimaban dichas razones para los máximos de ambas curvas entorno a 5, mientras que en los resultados simulados es de aproximadamente 20. Esta discrepancia podría ser fuente de error en la estimación de otras variables en el modelo, como temperatura, humedad superficial y viento, y podría deberse a un valor de humedad inicial de suelo no totalmente ajustado.

- La capa límite planetaria simulada parece alcanzar alturas máximas razonables y entorno a los pocos valores documentados para Santiago (Undurraga, 2009). Sin embargo, posiblemente exista un crecimiento tardío de ésta en horas de la mañana, respecto a los resultados de otros modelos numéricos corridos para Santiago (no mostrado), lo cual reduciría en exceso el volumen de dispersión de trazas en las primeras horas de la mañana. Sin embargo, al igual que en el punto anterior, debido a falta de datos observados no es posible corroborar esto empíricamente.
- Respecto a la temperatura, la simulación realizada muestra en general resultados aceptables para el 30% de los valores horarios de todas las estaciones. Por su parte, la discrepancia del otro 70% está dada por una sobrestimación de la variable, principalmente la parte cálida del ciclo. Por su parte, la variabilidad interdiaria es bien capturada por el modelo en las estaciones analizadas.
- La humedad es representada en forma aceptable por el modelo, en especial en lo referido a la variabilidad sinóptica presente en el periodo. Sin embargo, en el ciclo diario el modelo tiende a subestimar la magnitud, producto probablemente de un factor de humedad de suelo inicial no totalmente ajustado en el modelo. También se observaron problemas puntuales respecto a la representación de fenómenos de menor escala, como advecciones de aire costero hacia el valle de Santiago, lo cual en general, es un problema para la mayoría de los modelos de mesoescala.
- El ciclo diario de la magnitud del viento es estadísticamente bien representado sólo para el 20% de las medias horarias de todas las estaciones, producto de una persistente sobrestimación de la variable por parte del modelo. Esto podría deberse a la sobrestimación de la temperatura en el modelo, lo cual induciría a un exagerado calentamiento en la superficie, gradientes horizontales intensificados de temperatura y de presión por ende, sobrestimación en la intensidad del viento. Por otro lado, se debe considerar además que, dado lo sensible que es el parámetro a las condiciones locales

como la topografía, no es extraño encontrar algunas discrepancias principalmente respecto a la dirección del viento, en alguno de los puntos comparados.

- En resumen, gran parte de las discrepancias descritas entre lo modelado y lo observado en las variables analizadas en esta sección son debidas al aparente desajuste del factor de humedad inicial utilizado en la simulación. Como se menciona en la sección 4.2, las pruebas de sensibilidad hechas anteriormente consideraron reanálisis NCEP; sin embargo, las pruebas finales utilizaron datos CPTEC, para los cuales no pudo ser realizada, de manera análoga a lo estudiado con los datos NCEP, una prueba de sensibilidad detallada. Por ende, no se exploró un factor de humedad inicial de suelo óptimo para dichos datos, lo cual es una tarea futura que debiera ser realizada en pos de mejores resultados en la modelación.

4.7 Resultado de simulación para CO

En esta sección se hará un estudio del comportamiento de las razones de mezcla de CO, con los resultados obtenidos en la simulación y con los datos observados disponibles. En una primera parte se analizarán los resultados de las salidas en cuanto al comportamiento espacial de la traza, tanto en el plano horizontal (latitud – longitud) como en el vertical (latitud – altura), considerando temporalmente su variación diaria. Posteriormente se realizará una comparación estadística de las series de tiempo y ciclos diarios de las razones de mezcla de CO simuladas y las obtenidas de las observaciones disponibles de la red de monitoreo. Finalmente, se hará una revisión de los resultados modelados obtenidos en este trabajo, en el marco de los respectivos obtenidos en trabajos previos de simulación de CO para la ciudad de Santiago.

4.7.1 Distribución horizontal de la razón de mezcla

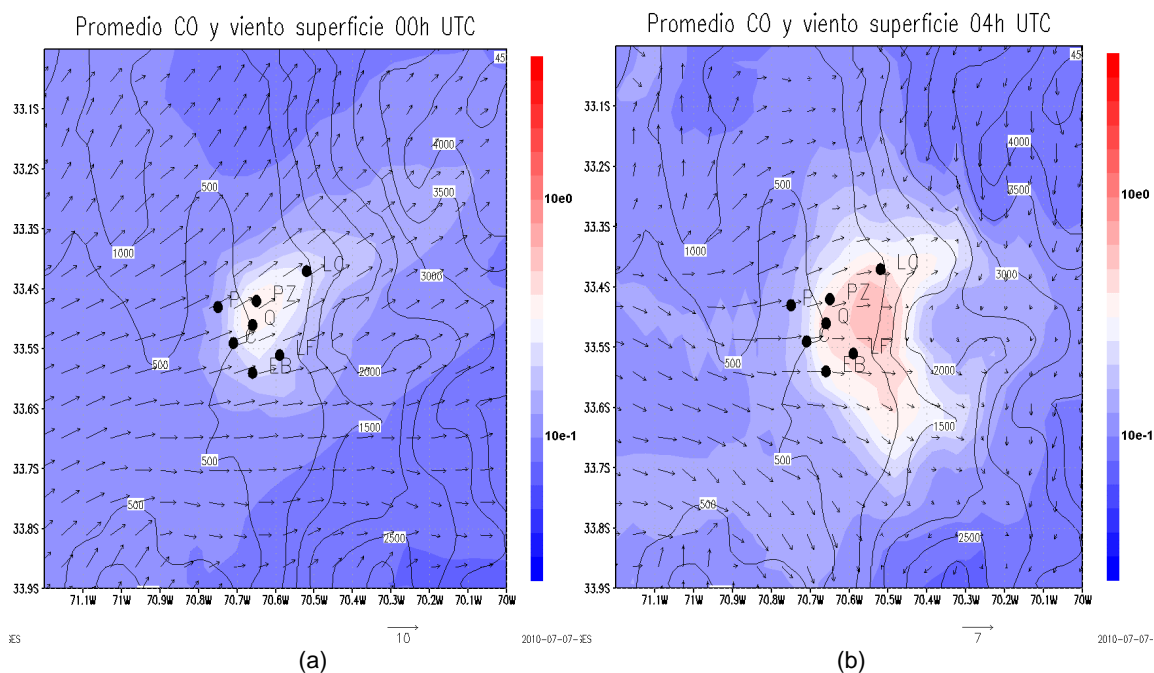
En la figura 36 se muestra el comportamiento medio del vector viento en el primer nivel del modelo, razón de mezcla superficial de CO y topografía para las horas 00, 04, 08, 12, 16 y 20UTC (-3, hora local).

En la madrugada (04 y 08, hora UTC, figura 36-b y 36-c respectivamente) se aprecian vientos débiles en el valle y flujo catabático en la cordillera de Los Andes, en particular sobre las zonas de mayor pendiente orográfica (a la derecha de cada figura). Por su parte, es observado un aumento en la razón de mezcla de CO en la zona oriente de la ciudad a las 04 horas UTC (figura 36-b), el cual podría ser explicado por la recirculación de la pluma de CO, desde la zona cordillerana ubicada al norte de la ciudad hacia la misma, lo cual fue documentado anteriormente en Schmitz (2005) y la contribución del segundo máximo de emisiones de CO, que se produce una hora antes (figura 3). A las 08 UTC (figura 36-c), la pluma se sigue desplazando al sur, pero con menores valores simulados de CO.

Posteriormente a las 12 horas UTC (figura 36-d), producto de la marcada estabilización de la atmósfera dada por el máximo de enfriamiento superficial, se aprecian viento prácticamente calma sobre toda la superficie del valle de Santiago. Además, a esa hora se encuentran los máximos diarios de emisión de CO (figura 3); todo lo cual incide a que se produzcan las más altas razones de mezcla de CO en el día, las que se sitúan entorno al centro de la ciudad (Parque y La Paz), donde se ubican los máximos de emisión.

A mediodía (16 horas UTC, figura 36-e) se observa un notorio cambio en el comportamiento del viento, ya que a esa hora predomina la circulación local del Oeste, dada por el flujo valle-montaña presente en prácticamente toda la cuenca, producto del calentamiento diurno. Junto a esto, ya a esa hora la capa límite ha alcanzado un importante desarrollo vertical, todo lo cual incide en un descenso de las razones de mezcla de CO, aunque se puede apreciar en el centro de la ciudad mayores valores de la traza, producto de las también mayores emisiones presentes en dicho sector de la urbe.

Finalmente, en horas de la tarde y noche (20 y 00 horas UTC, figura 36-f y 36-a respectivamente) se mantienen las condiciones de viento predominante del Oeste y las bajas razones de mezcla, productos de las buenas condiciones de ventilación presentes.



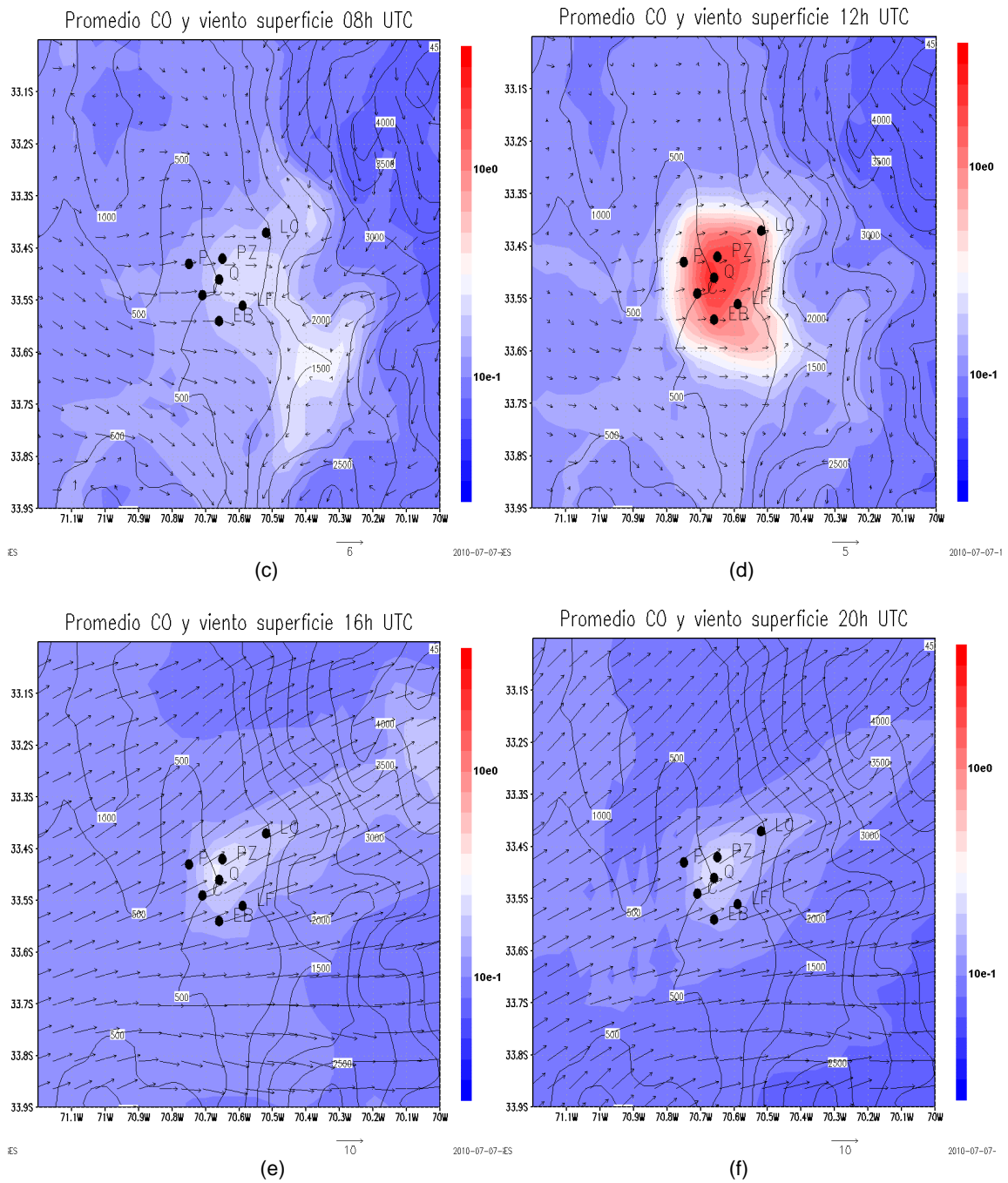


Figura 36. Distribución horizontal (latitud-longitud) de razones de mezcla medias horarias de CO del periodo de simulación, en ppm (sombreado), en escala logarítmica. Viento superficial medio en vectores y topografía en líneas negras, con altitudes en metros.

4.7.2 Distribución vertical de la razón de mezcla de CO

En la figura 37 se muestra el comportamiento medio en la vertical de las razones de mezcla de CO, en un corte latitudinal sobre los 33,45°S. Las horas del día seleccionadas, que son desplegadas en la figura 37, representan los aspectos más relevantes de la evolución diaria media del contaminante y de los factores meteorológicos relacionados con la calidad del aire, como la estabilidad atmosférica y el transporte. Para analizar la primera, se incluye en la figura la temperatura potencial; mientras que la segunda es esquematizada con vectores en la dirección zonal (u) y vertical (w), donde para facilitar el despliegue gráfico, tanto u como w fueron normalizadas, dada la diferencia en magnitud entre ambas. Por lo mismo, los vectores de la figura representan principalmente el esquema del flujo sobre la cuenca de Santiago, no así sus magnitudes en forma explícita. En el anexo 9 se presentan todas las figuras, cada 2 horas, que muestran la evolución de las variables recién mencionadas durante un día promedio.

Se puede ver en la figura 37-a las condiciones medias modeladas para las 06 horas UTC. En la superficie de la cuenca de Santiago (entre -70,9 y -70,6°W) aún existe flujo del oeste, lo que permite cierta mezcla atmosférica. Sin embargo, en el patrón de transporte sobre la atmósfera superior prevalecen los flujos descendentes, en particular sobre la cordillera de Los Andes, que llevan aire frío a la cuenca de Santiago. Los resultados de la simulación muestran además que existe una especie de “corriente” ascendente cerca de 70,6°W, que está inmersa dentro del patrón de descenso general observado sobre las montañas. Para esto no se tiene una explicación concreta ni antecedente previo documentado, sólo podría suponerse que se trata de flujo simulado en el modelo por compensación de masa, a causa del descenso predominante presente producto del efecto catabático en la cordillera. Por su parte, los contornos de temperatura potencial para esa hora muestran una creciente estabilización atmosférica, aunque aún existen perfiles verticales con aire mezclado cerca de la superficie (con una misma temperatura potencial), los cuales sin embargo no alcanzan más allá de 300 metros de altura. Finalmente, las razones de mezcla de CO para esa hora aún son bajas en la cuenca, dado que la estabilización atmosférica recién toma forma y además no existen todavía emisiones significativas de la traza.

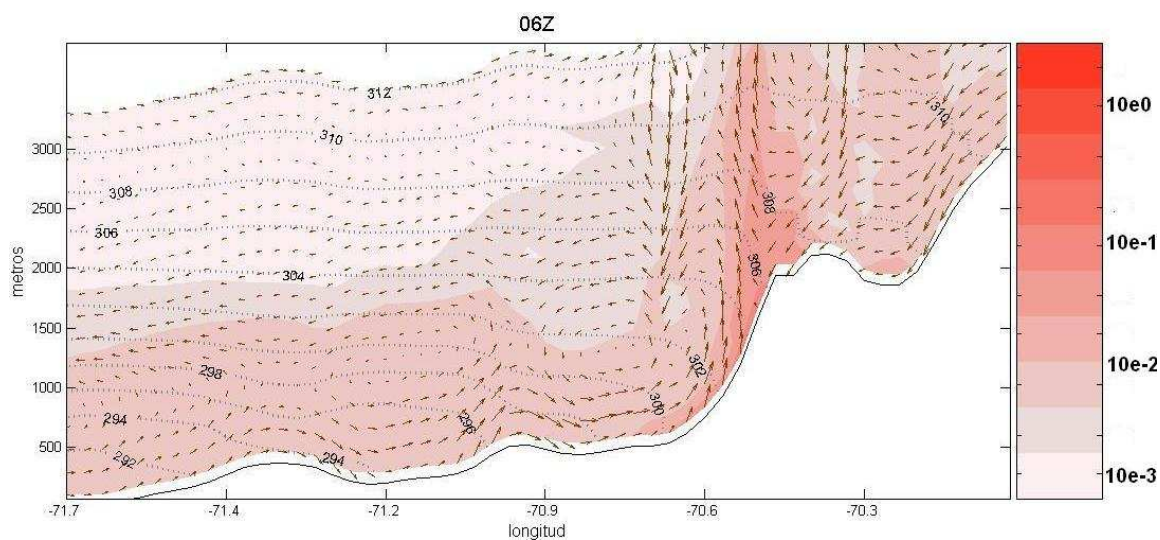
Para las 12 UTC (figura 37-b), se observa un fortalecimiento del proceso de estabilización atmosférica. Por ejemplo, en la superficie de la cuenca de Santiago se aprecian vientos débiles (casi calma), mientras que en altura sólo predomina el flujo descendente cerca de la cordillera, el cual es de menor intensidad que el observado en la figura 37-a. Por su parte, los contornos

de temperatura potencial muestran un fortalecimiento de la estabilización respecto a lo apreciado en la figura 37-a, lo cual produce la reducción de la capa de mezcla. Producto de la conjugación de los factores meteorológicos descritos anteriormente con la ocurrencia del máximo diario de emisiones, se observa un aumento considerable de la razón de mezcla de CO, quedando el contaminante restringido espacialmente en los niveles cercanos a la superficie. Observando con detención en la figura, donde se ubica la ciudad de Santiago (levemente a la izquierda de los $-70,6^{\circ}\text{W}$, en el máximo de CO), se aprecia que la mayor parte del contaminante se encuentra restringido en los primeros 100 metros de altura sobre la ciudad.

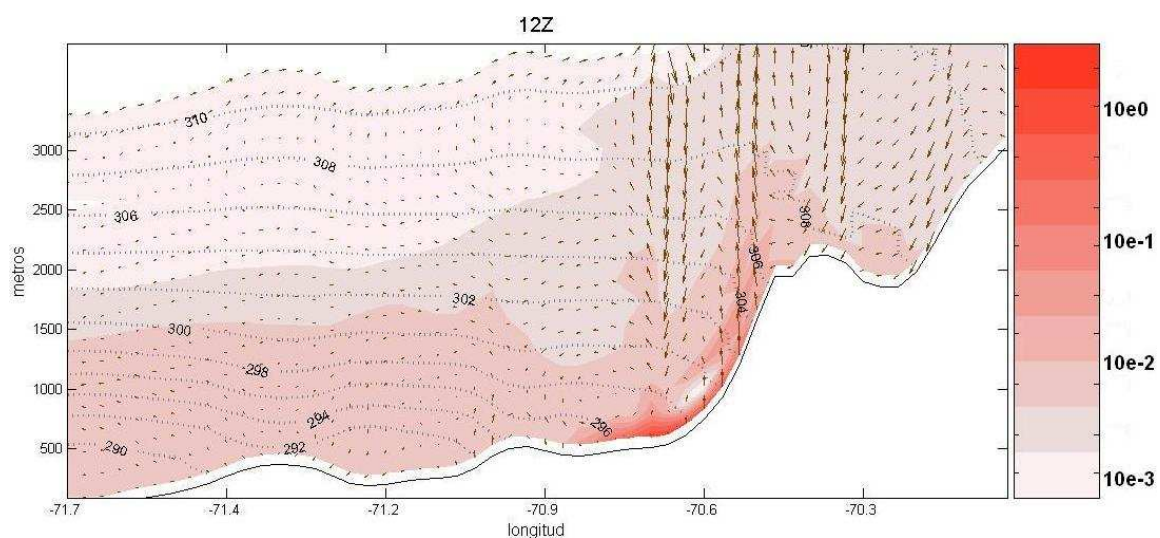
A las 14 horas UTC (figura 37-c), se observa una disminución de la cantidad de CO sobre la ciudad (ubicada entorno a -70.65°W) y un transporte del mismo hacia zonas altas, producto que el calentamiento diurno sobre la cuenca activa la circulación local de vientos y produce mezcla atmosférica. Esto último puede ser visualizado con el comportamiento de la temperatura potencial, en particular en los niveles verticales cercanos a la superficie, donde se aprecian una capa mezclada reflejada en valores de temperatura potencial similares en la vertical. Dicha capa presenta a esa hora un espesor aproximado de 800 metros entorno a $-70,6^{\circ}\text{W}$, donde se ubica el área urbana de Santiago. Por otro lado, analizando los vectores puede verse el ascenso del aire sobre la ladera andina próxima a la ciudad, inducido por la circulación del oeste en la cuenca, que al encontrar el obstáculo de la cordillera se ve forzada a ascender. Este ascenso del aire produce en el tope de la figura viento débil del este (alrededor de los 3000 metros) y una componente descendente al occidente, probablemente por compensación al ascenso mencionado, lo cual configura una celda cerrada de circulación, de unos 3000 metros de altitud y un par de décimas de grados de longitud, entorno a los $-70,6^{\circ}\text{W}$. Es llamativo que en esta figura se presenten valores más altos de razones de mezcla de CO en la zona cordillerana que en el área donde se ubican las principales emisiones, considerando que éstas, después del máximo diurno, se mantienen en general altas (figura 3). Se debe analizar con mayor detalle este “efecto chimenea” dado por el ascenso forzado del contaminante, a causa del viento y la presencia de un obstáculo orográfico, a cotas superiores; en función de determinar si las altas razones de mezcla de CO modeladas en la alta cordillera son observables o son “artefactos” del modelamiento, lo cual podría verificarse, por ejemplo, a través de campañas de medición en esas zonas.

Finalmente, la figura 37-d muestra el esquema de circulación, estabilidad y razones de mezcla de CO para las 20 horas UTC. Se observan en general las mismas características descritas en la figura anterior, pero intensificadas. Por ejemplo, el patrón de viento oeste en la superficie en los valles es más marcado, al igual que el ascenso en la ladera occidente de la cordillera; de la misma forma el flujo del este en altura es claro y se extiende al oeste más de 1 grado de

longitud desde los $-70,6^{\circ}\text{W}$, por lo tanto el tamaño de la celda de circulación en la horizontal es mayor. Respecto al perfil térmico y la condición de estabilidad presente, se evidencia la notable mezcla en la vertical, la cual en la cuenca de Santiago alcanza alturas aproximadas de 1500 metros, y va descendiendo gradualmente mientras se avanza hacia el oeste. Esto probablemente sea a causa del mayor predominio de calor sensible sobre el latente en los valles interiores, menos influenciados por los efectos de la humedad del mar. Todo esto incide en los bajos valores de CO presentes en la cuenca de Santiago a esa hora.



(a)



(b)

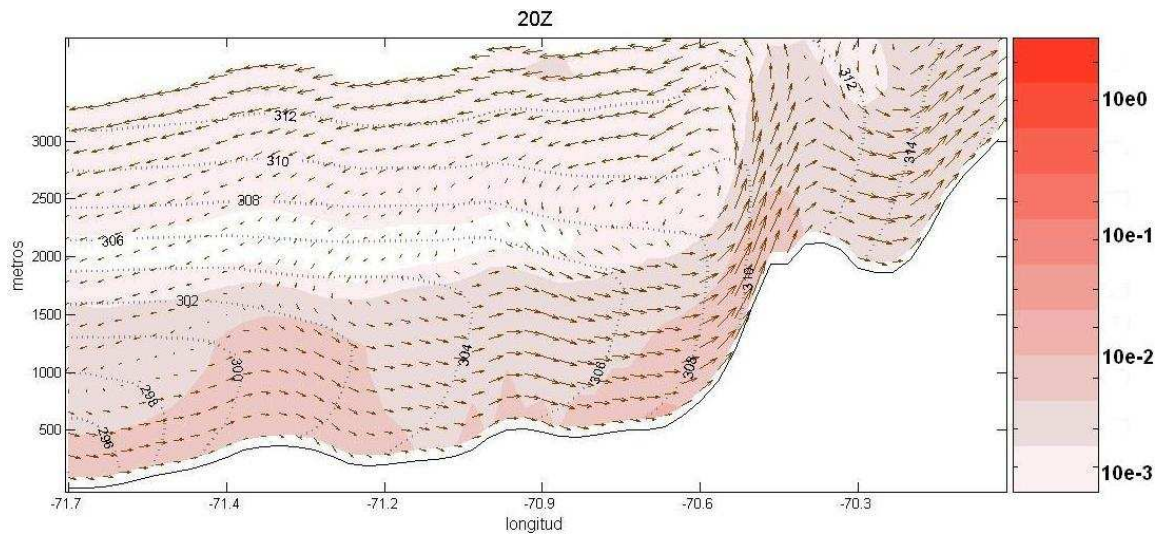
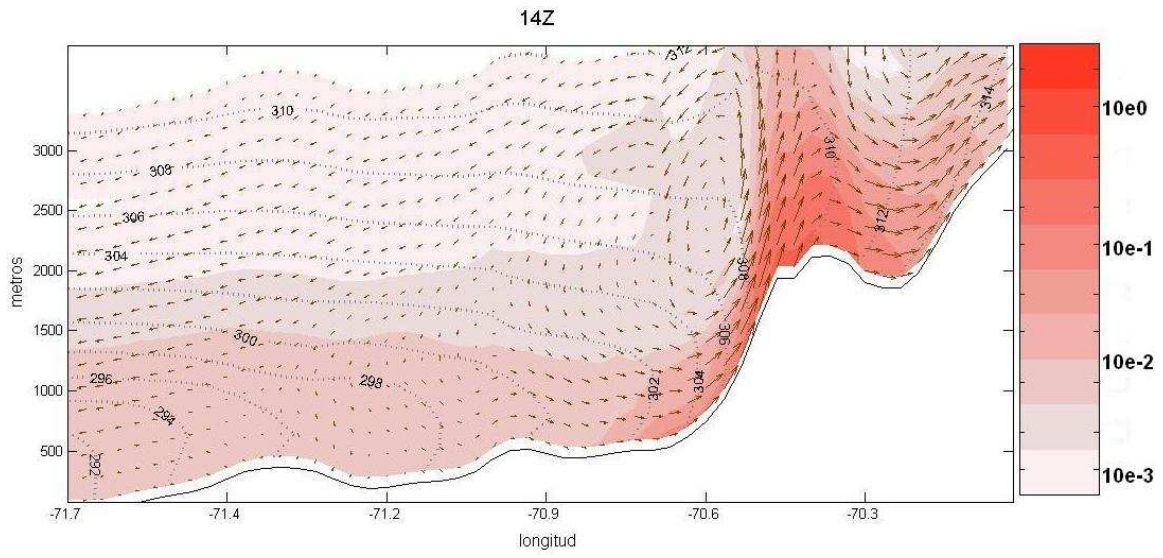


Figura 37. Distribución vertical (latitud-Z) de razones de mezcla medias horaria de CO del periodo de simulación, en ppm (escala logarítmica). En la abscisa se ubican las longitudes y en la ordenada la altura en metros.

4.7.3 Comparación del ciclo diario observaciones - modelo

La figura 38 muestra la comparación de los ciclos diarios observados y modelados en el periodo de simulación. Las estaciones fueron agrupadas en función de la similitud de su variabilidad diaria, por lo tanto las descripciones fueron hechas para las categorías encontradas.

Según los valores observados en el periodo de análisis, las estaciones de El Bosque, La Florida y Pudahuel (figura 38-a, 38-b y 38-c) observaron 2 máximos diarios: uno en la noche y otro en horas de la madrugada. En la simulación se logra representar correctamente en magnitud sólo este último máximo, ya que el de la noche, si bien lo simula, es de menor magnitud (en al menos 4 veces). Respecto al máximo nocturno, el valor medio de las observaciones tiene una variabilidad mayor que el de madrugada, lo cual hace más difícil su captura. La hora de ocurrencia del máximo modelado de la madrugada está levemente desfasada, en promedio en una hora.

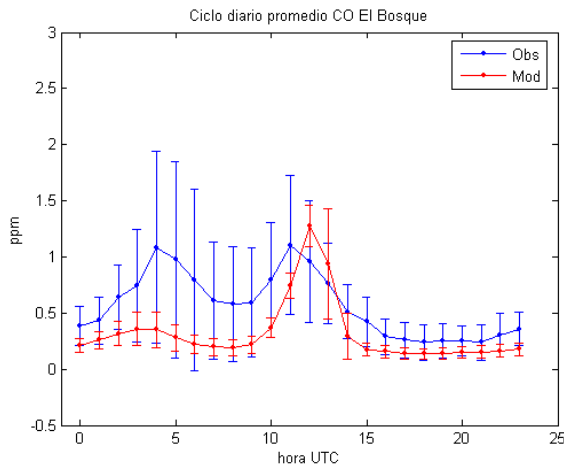
Por su parte, los valores observados de las estaciones de Cerrillos y Parque (figura 38-d y 38-e) también muestran un ciclo diario bimodal, con máximos en la noche y madrugada; sin embargo, para estas estaciones el modelo sobrestima el máximo de la madrugada, en al menos 2 veces; mientras que para el máximo nocturno, al igual que en el grupo de estaciones anteriormente descrito, los resultados simulados subestiman las magnitudes medias de la traza.

Para los datos observados que se analizaron, solamente la estación de La Paz (figura 38-f) mostró un ciclo medio unimodal, con un único máximo en la madrugada, el cual es sobrestimado por el modelo en al menos 3 veces su magnitud, respecto al observado.

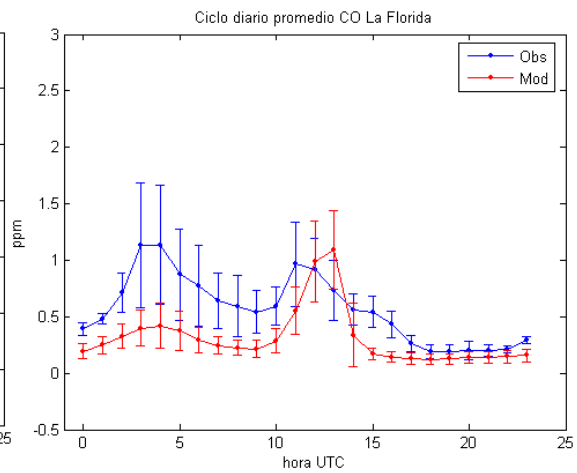
Finalmente para la estación de Las Condes (figura 38-g), el análisis de los datos observados en el periodo estudiado no mostró ningún máximo relevante de razón de mezcla de CO. Sin embargo el modelo sí simula un marcado máximo en la madrugada, el cual podría deberse al exagerado transporte que podría tener el modelo, dado por la sobrestimación de la magnitud del viento descrita en la sección 4.5.2 del trabajo, en horas en que aún la capa límite atmosférica presenta baja altura. Respecto a este punto, se sospecha que podría existir algún problema en la evolución temporal de la altura de la capa límite (un crecimiento de la PBL más lento que lo real, según lo descrito en la sección 4.2), ocasionando que, al empezar el flujo local de viento del Oeste y estando la capa límite aún muy baja, se produzca un transporte "raso" de contaminantes hacia el Este de la ciudad, lo cual podría producir estos máximos sobrestimados

en el modelo. Sin embargo, al existir poca información respecto a la altura observada de la PBL se dificulta la comprobación que el problema de la sobrestimación sea por esta causa.

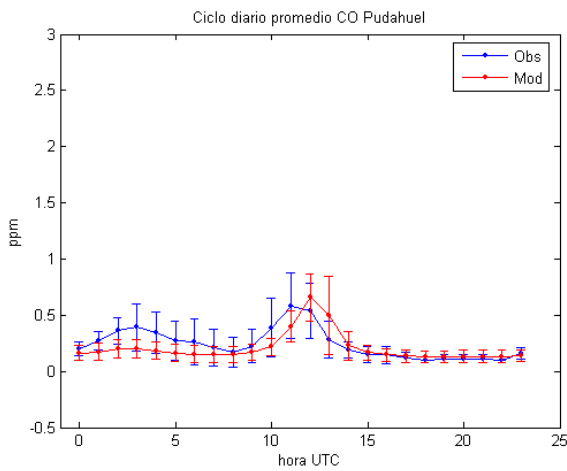
El resto de las horas, en general, son bien simuladas las razones de mezcla de CO para prácticamente todas las estaciones.



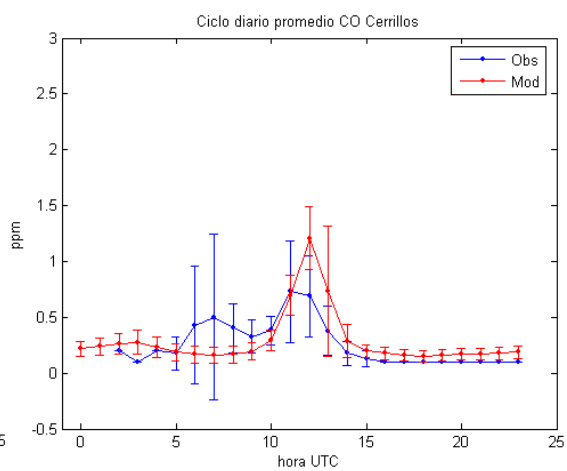
(a)



(b)



(c)



(d)

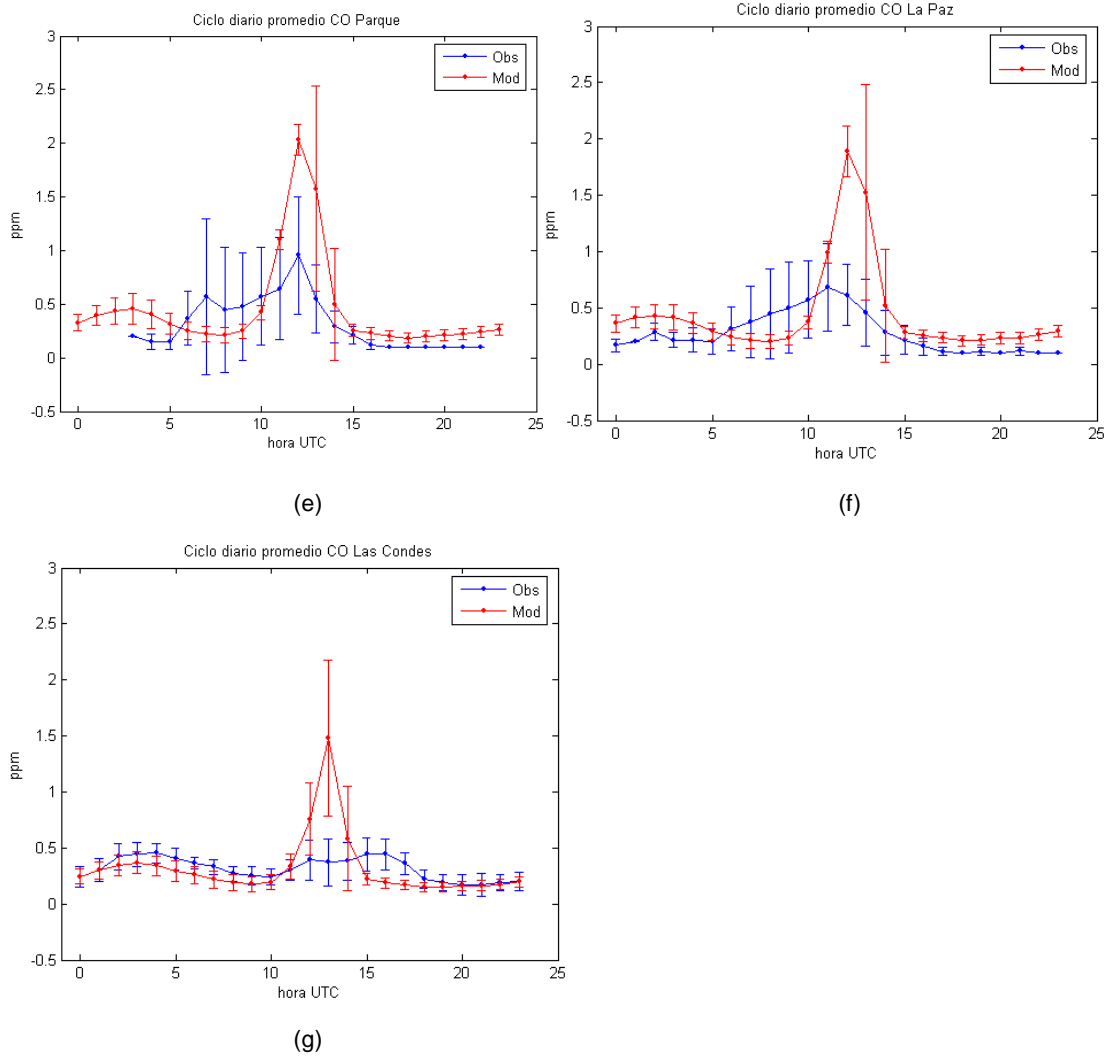


Figura 38. Ciclos diarios medios de razón de mezcla de CO observada y modelada por CCATT-BRAMS para estaciones urbanas. Las barras de error representan ± 1 desviación estándar tanto de las observaciones como del modelo.

La significancia estadística de las medias y desviaciones estándar es estimada por medio del test de bootstrap, siendo los resultados presentados en la tabla 14.

Tabla 14. Resultados cualitativos del test bootstrap para diferencia de medias de razón de mezcla de CO.

| hora | El Bosque | Cerrillos | Pudahuel | Parque | Las Condes | La Florida | La Paz |
|------|-----------|-----------|----------|---------|------------|------------|---------|
| 0 | Rechaza | | Acepta | | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 1 | Rechaza | | Rechaza | | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 2 | Rechaza | Acepta | Rechaza | | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 3 | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 4 | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 5 | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 6 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 7 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 8 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 9 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 10 | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta |
| 11 | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 12 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza |
| 13 | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 14 | Rechaza | Acepta | Acepta | Acepta | Acepta | Rechaza | Acepta |
| 15 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Acepta | Rechaza | Rechaza | Acepta |
| 16 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 17 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 18 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza | Rechaza | Rechaza |
| 19 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 20 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 21 | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 22 | Rechaza | Rechaza | Acepta | Rechaza | Acepta | Rechaza | Rechaza |
| 23 | Rechaza | Rechaza | Acepta | | Acepta | Rechaza | Rechaza |

Los resultados del test muestran que para las medias horarias, en el 36% la hipótesis nula es aceptada; esto es, las medias observadas y modeladas son estadísticamente no diferenciables. Por su parte, el test para la desviación estándar dio como resultado que para el 53% de las horas es aceptada la hipótesis nula, o sea la desviación estándar observada y modelada no es estadísticamente diferenciable.

4.7.4 Comparación del ciclo diario observado para día de semana y día de fin de semana

En este apartado se hará una somera comparación entre los ciclos diarios de razones de mezcla de CO para un día de semana (lunes-viernes) y un día de fin de semana (sábado-domingo), con valores observados. El periodo utilizado para la comparación es el mismo que el considerado en la simulación, el cual tiene una longitud temporal sólo de 10 días, probablemente poco tiempo para permitir un análisis estadístico más robusto. La figura 39 muestra los ciclos diarios medios observados para un día de semana, junto con el respectivo para un fin de semana, en las estaciones de El Bosque, La Florida y Pudahuel.

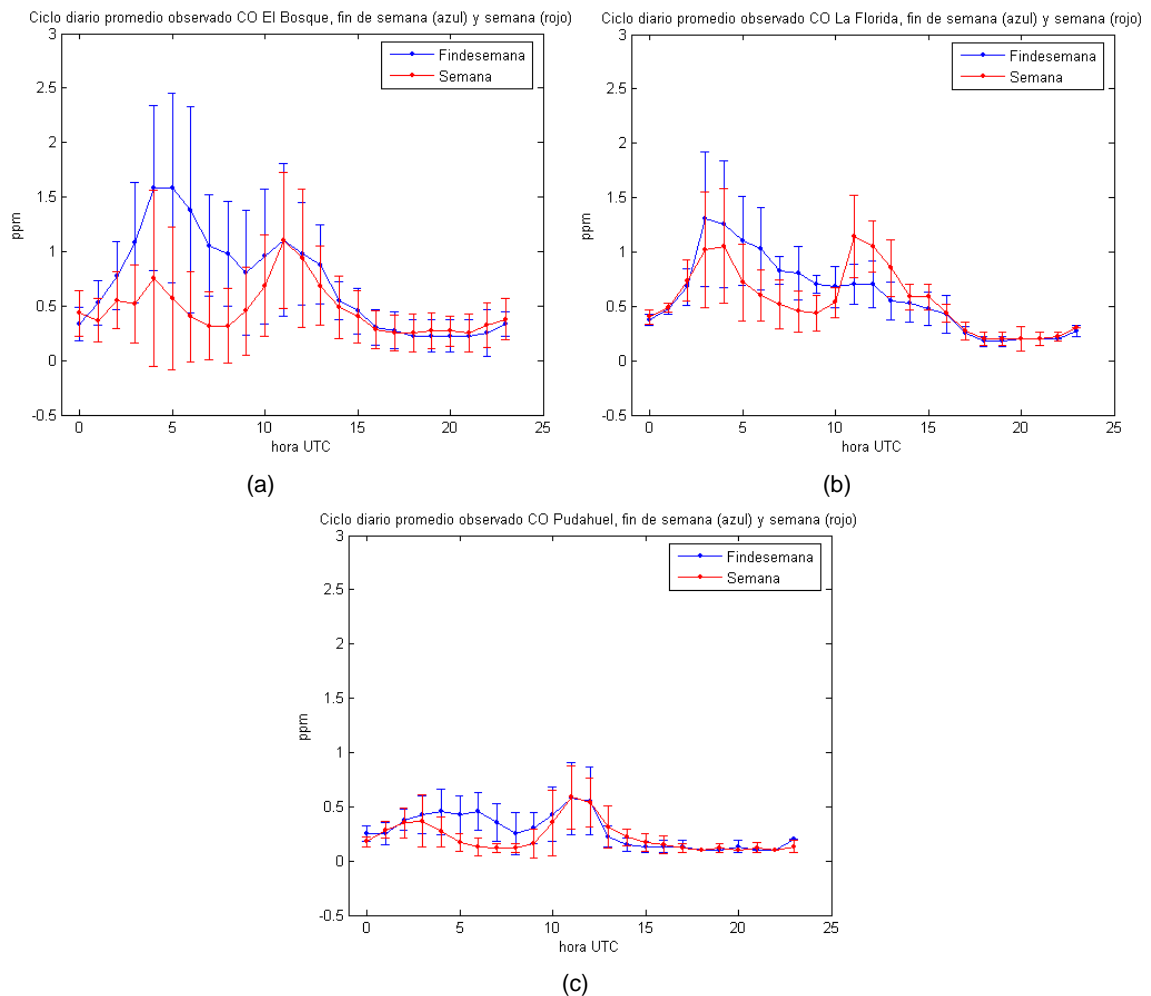


Figura 39. Ciclos diarios medios de razón de mezcla de CO observada, para un día de semana y un día de fin de semana, estación El Bosque (a), La Florida (b) y Pudahuel (c). Las barras de error representan ± 1 desviación estándar.

La figura 39-a muestra para El Bosque que el máximo nocturno (entorno a la 5 UTC) es 3 veces mayor en un día promedio de fin de semana, respecto a un día promedio de semana; mientras

que desde las 11 UTC en adelante el comportamiento de las razones de mezcla es muy similar entre ambas curvas. Por su parte, la figura 39-b muestra los ciclos diarios para La Florida; respecto al máximo nocturno, al igual que en El Bosque, es mayor en un día de fin de semana que en un día de semana. Por el contrario, el máximo de madrugada del ciclo diario medio de un día de semana no se registra el fin de semana. Finalmente, la figura 39-c muestra los ciclos diarios para las estación de Pudahuel, donde nuevamente el máximo nocturno es mayor en un día de fin de semana respecto a un día de semana. Aparte de esta diferencia, el resto del ciclo es similar entre ambas curvas.

Considerando que el inventario local de emisiones de Santiago, usado en la corrida, no considera diferencias entre días de semana y fines de semana, no se consideró necesario hacer el análisis con los datos modelados.

4.7.5 Comparación del ciclo interdiario de CO

Al igual que en las variables analizadas meteorológicas analizadas en este capítulo, se extrajo el ciclo diario a la serie de tiempo de razón de mezcla de CO para cada estación. Sin embargo, las anomalías resultantes fueron series de tiempo entorno a cero, sólo con algunas oscilaciones entorno a los máximos del ciclo diario (figura 40). Esto indica que gran parte de la varianza está contenida en el ciclo diario, siendo las fluctuaciones de distinta frecuencia a ésta poco relevantes, al menos en las series de tiempo estudiadas. Por lo tanto, los análisis estadísticos de la variabilidad interdiaria incluirán los ciclos diarios.

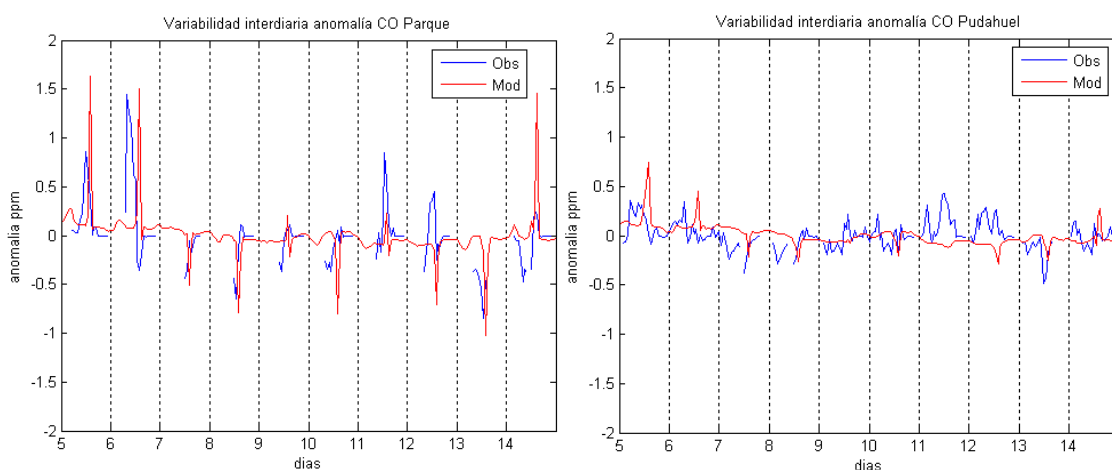


Figura 40. Series de anomalías de razón de mezcla de CO observada y modelada por CCATT-BRAMS.

Dicho lo anterior, se hace una evaluación de los resultados del modelo para el periodo diurno y nocturno, siendo definido el primero entre las 9 y 23 horas UTC, mientras que el nocturno ocupó las horas restantes. Se calcula coeficiente de correlación, desviación estándar modelada y observada para cada caso.

Tabla 15. Coeficientes de correlación y desviación estándar observada y modelada, razón de mezcla de CO observada del periodo diurno.

| | r | std_obs | std_mod |
|------------|------|---------|---------|
| El Bosque | 0,45 | 0,42 | 0,37 |
| Cerrillos | 0,64 | 0,30 | 0,34 |
| Pudahuel | 0,52 | 0,21 | 0,20 |
| Parque | 0,61 | 0,39 | 0,62 |
| Las Condes | 0,19 | 0,15 | 0,42 |
| La Florida | 0,56 | 0,30 | 0,35 |
| La Paz | 0,45 | 0,29 | 0,58 |

Tabla 16. Coeficientes de correlación y desviación estándar observada y modelada, razón de mezcla de CO observada del periodo nocturno.

| | r | std_obs | std_mod |
|------------|------|---------|---------|
| El Bosque | 0,09 | 0,61 | 0,12 |
| Cerrillos | 0,33 | 0,39 | 0,09 |
| Pudahuel | 0,17 | 0,17 | 0,07 |
| Parque | 0,02 | 0,52 | 0,13 |
| Las Condes | 0,25 | 0,11 | 0,10 |
| La Florida | 0,57 | 0,41 | 0,14 |
| La Paz | 0,00 | 0,21 | 0,12 |

El modelo presenta mejores resultados para las condiciones diurnas (tabla 15) que nocturnas, ya que los coeficientes de correlación por estación son notablemente mejores que en la noche (tabla 16). En cuanto a la desviación estándar, para el caso diurno la variabilidad modelada es considerablemente mayor que la observada, por la sobrestimación que presenta el modelo de los máximos en la madrugada. Por el contrario, en la noche la variabilidad modelada es menor que la observada, esto porque en varias estaciones el modelo subestima el máximo de CO que ocurre en la noche.

4.7.6 Comparación de resultados de razones de mezcla de CO de CCATT-BRAMS con trabajos previos

En esta sección, los resultados obtenidos en este trabajo son comparados con los logrados en trabajos previos para CO en la cuenca de Santiago, los cuales se detallan a continuación.

En Gallardo *et al* 2000, para una simulación realizada con el modelo HIRLAM-MATCH, modelo off-line, para enero de 1998, se encontraron las máximas razones de mezcla en la zona centro de Santiago, en concordancia al lugar donde ocurren las más altas emisiones. Dicho modelo fue

capaz de capturar los rasgos generales del ciclo diario de las razones de mezcla, simulando las más altas en la mañana y en la noche, entorno a las horas de mayor tráfico vehicular. Los valores diurnos de razones de mezcla fueron sobrestimados y los nocturnos subestimados. La hora de máximas razones de mezcla diurnas coincide con la hora de máxima emisión (08 horas local). Comparando estos resultados con los obtenidos en CCATT-BRAMS, existe concordancia en ambos experimentos en que los máximos valores de razones de mezcla modeladas se encuentran en la zona centro (Parque) y norte (La Paz) de la ciudad. En Gallardo *et al*, se aprecia una sobrestimación de las razones de mezcla matinales en la zona centro de la ciudad; al igual que los resultados obtenidos en CCATT-BRAMS. Respecto al máximo nocturno de CO, los resultados modelados, tanto de Gallardo *et al* como los obtenidos en este trabajo, indican valores subestimados en varias estaciones.

En Schmitz 2005, fueron descritos los resultados de una simulación para enero de 2002, realizada por el modelo MM5-CADM, donde se mostró que éste fue capaz de reproducir los principales rasgos del comportamiento temporal y espacial de las razones de mezcla de CO en la cuenca de Santiago. Se concluyó que durante el día, los contaminantes son transportados hacia el noreste de la ciudad y ventilados fuera de la cuenca por los vientos ladera arriba hacia la cordillera de los Andes. Durante la noche, la región norte de la ciudad es la mayormente afectada, producto de efectos de transporte. Se observa que las razones de mezcla promedios fueron sobrestimadas en forma considerable en las estaciones de Parque y Cerrillos. En concordancia con este estudio, los resultados obtenidos con esta implementación de CCATT-BRAMS son capaces de reproducir los patrones horizontales medios de las razones de mezcla de CO en la cuenca. Sin embargo, también en Schmitz, 2005 se encuentra una sobrestimación de razones de mezcla de CO, en particular en Cerrillos y Parque, donde incluso en esta última los valores medios simulados son hasta 5 veces mayores que las observaciones, magnitud mayor que la obtenida en CCATT-BRAMS.

En Saide, 2008, en simulaciones realizadas con MM5-POLYPHEMUS, los patrones horizontales medios de las razones de mezcla de CO están de acuerdo a lo mostrado para CCATT-BRAMS, esto es, condiciones de más altas razones de mezcla entorno a las 8 horas local, acorde al máximo de emisiones de CO, junto con vientos débiles en toda la cuenca y máxima estabilidad atmosférica. Hacia mediodía, por efectos de mezcla turbulenta, se produce el aumento de la altura de la capa de mezcla y el flujo en la cuenca de tipo valle-montaña, lo que transporta la pluma de contaminantes hacia el noreste y disminuye las razones de mezcla en toda la ciudad. En la noche, por el cese de la radiación de onda corta se produce el enfriamiento radiativo superficial, restableciendo condiciones estables en la vertical, debilitándose además los vientos

en el valle. Los ciclos diarios de CO de las estaciones analizadas muestran en Saide 2008 una buena representación, aunque hay algunas en la que se subestiman las razones de mezcla (La Florida y Las Condes) y en otras se sobrestiman (Santiago, La Paz y Cerrillos), tal como lo que ocurre en CCATT-BRAMS. Finalmente para Pudahuel y El Bosque se logran conseguir buenos resultados.

En los trabajos reseñados anteriormente, se han conjeturado diversas explicaciones respecto a los problemas que han presentado los modelos en representar las principales características del comportamiento de las razones de mezcla de CO, siendo la más recurrente los problemas e inexactitudes de los inventarios de emisiones disponibles.

Conociendo las dificultades propias en las estimaciones de dichos inventarios y las limitaciones propias que estos presentan, se considera en este trabajo enfocar la problemática de las discrepancias del modelo entorno a buscar el mejor ajuste físico posible (configuración meteorológica, elección correcta de parametrizaciones) antes de atribuir los errores casi en su totalidad a la calidad del inventario.

Cuestionamientos a la física usada por los respectivos modelos fueron hechos en Gallardo 2000, donde se señala que HIRLAM-MATCH no contaba con los datos adecuados de uso de suelo, que representarían de forma correcta la característica urbana del suelo de la ciudad, lo cual induciría inadecuadas estimaciones de flujos superficiales de energía y afectaría la correcta simulación de la mezcla vertical. En Schmitz, 2005, a pesar que se menciona que no es el objetivo central del estudio profundizar en una evaluación de la simulación meteorológica propiamente tal, se reconocen problemas, por ejemplo, en la representación nocturna del comportamiento del viento.

Finalmente en Saide, 2008, aparte del problema del inventario de emisión, se atribuyen las discrepancias de las razones de mezcla nocturnas a mezcla atmosférica exagerada, considerando como indicador de ésta la diferencia de temperatura entre puntos en la cuenca y la cordillera de la costa, la cual MM5-POLYPHEMUS subestimaría; con lo cual se dedujo que la mezcla vertical se exageraba en el modelo. Se encontró además que se sobrestimaba la magnitud del viento, lo cual aumentaría la dispersión y disminuiría las razones de mezcla.

4.7.7 Conclusiones sobre resultados de simulación de dispersión para CO

- La distribución espacial horizontal media de las razones de mezcla de CO y viento durante el día es representada por el modelo en concordancia a lo mostrado en trabajos previos, observando las máximas razones de mezcla de contaminante entorno a la hora de máxima estabilidad atmosférica en niveles bajos. Durante el día se simula el mejoramiento de la ventilación, dado por el calentamiento superficial que induce viento local diurno de dirección Oeste y el crecimiento de la PBL.
- En el perfil vertical de CO, a media mañana se presenten altos valores en la zona cordillerana, incluso mayores que en el área urbana, donde se ubican las principales emisiones. Esto puede ser atribuido a un “efecto chimenea”, dado por el ascenso forzado del contaminante a causa del viento y la presencia de un obstáculo orográfico, sumado además al calentamiento de las laderas y su efecto sobre el crecimiento adicional que podría tener sobre la capa de mezcla. Sería interesante determinar, a través de alguna campaña de medición, si estos máximos en la alta cordillera son verificables o sólo son resultados del modelo.
- Analizando en el corte vertical los vectores de movimiento (figura 37), puede verse en el modelamiento una celda de circulación en sentido latitudinal, entre la zona costera y la cordillera, entorno a los -33.45 grados de latitud, que muestra en superficie viento del oeste, ascenso en la parte oriental por efecto de la cordillera y flujo del este en altura que va en gradual descenso mientras se desplaza hacia el océano. En horas de la mañana, dicha celda tiene unos 3000 metros de altitud y un par de décimas de grados de longitud, entorno a los -70,6 de longitud. Durante el día, a la vez que se intensifica el calentamiento y los flujos superficiales, dicha celda se extiende al oeste en más de 1 grado de longitud, desde los -70,6 grados, intensificándose los vectores en cada lado de la celda.
- El ciclo diario de razones de mezcla de CO para cada estación es representado por el modelo con una leve sobrestimación del máximo diurno de CO y una subestimación del máximo nocturno, siendo las discrepancias atribuidas a problemas en la evolución de la capa límite planetaria modelada. La evaluación estadística indicó que cerca del 40% de

promedios horarios y el 50% de las desviaciones estándar de las estaciones son bien representados por el modelo.

- Las razones de mezcla de CO modeladas por CCATT-BRAMS presentan mejores resultados para la parte diurna del ciclo que en la noche, en acuerdo con lo mostrado por resultados previos de modelamiento de CO sobre la cuenca de Santiago. Esto puede ser atribuido a las incertezas presentes, tanto en las emisiones nocturnas como en la estimación de la capa límite en ese periodo, todo lo cual podría inducir a errores en la estimación de la traza por parte del modelo. Por otro lado, respecto a la variabilidad interdiaria de las razones de mezcla de CO, resultó ser poco relevante en el periodo estudiado.
- Los ciclos diarios observados de CO para días de semana y fines de semana presentaron diferencias principalmente respecto al máximo nocturno, el cual resultó ser mayor en fines de semana que en días laborales, probablemente por cambio en los patrones de emisión. Sin embargo, dado lo corta de la serie de tiempo estudiada (10 días), no podría definirse si esta diferencia responde a un efecto del ciclo semanal de emisiones o podría coincidir con alguna situación favorable o desfavorable en las condiciones de ventilación.

5 Resultados de simulación para O₃

5.1 Introducción

En este capítulo se presenta la evaluación de la simulación de ozono y precursores fotoquímicos, realizada para 10 días del mes de enero de 2002 con el modelo CCATT-BRAMS, siendo elegido el mecanismo químico RACM (Stockwell *et al*, 1997). Se usa la configuración espacial descrita en el capítulo 3, considerando condiciones iniciales y de borde atmosféricas CPTEC (Cavalcanti *et al*, 2002, Marengo *et al*, 2003) y no se consideran condiciones iniciales y de borde químicas. Previamente, se estimará el potencial de formación de ozono, en función de las razones entre COV y NO_x, presentes en el inventario local de emisiones, que será ingresado como condición de borde superficial en la simulación. Finalmente y posterior a la revisión y evaluación de los resultados de CCATT-BRAMS, se hará una comparación de los resultados de O₃ simulados por otros modelos en Chile (WRF-CHEM y POLYPHEMUS-MM5) con los propios obtenidos en CCATT-BRAMS.

5.2 Razones COV/NO_x del inventario local

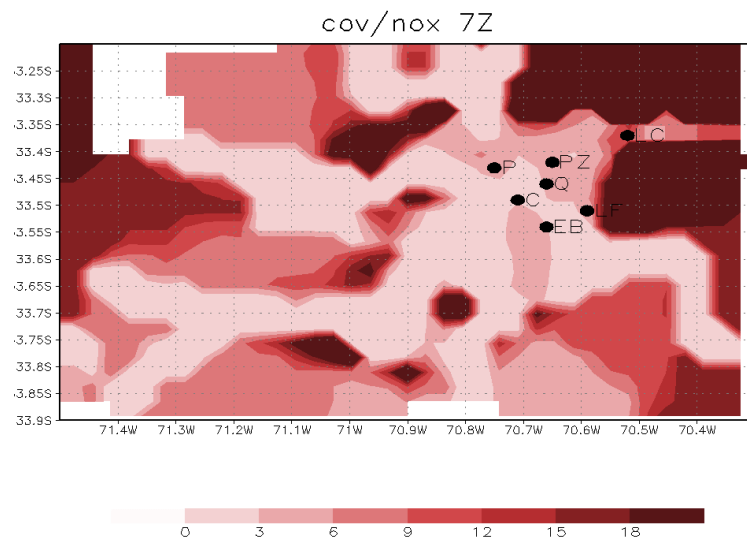
Se considera necesario analizar los datos provenientes del inventario de emisiones locales de la ciudad de Santiago, con el objeto de estudiar la razón entre COV y NO_x presente en él, dada la importancia de dicha razón en función de la reactividad de ambas sustancias con el radical OH, clave en la química de la formación del O₃. Tanto los COV como NO_x “compiten” por reaccionar con el radical, el primero para iniciar la secuencia de oxidación que la postre producirá O₃, mientras que el segundo para consumir NO₂ y para remover radicales OH, luego de agotados los NO_x (Seinfeld y Pandis, 1998). Se estimó que la tasa constante de reacción de los OH con el NO₂ es aproximadamente 5.5 veces más rápida que la propia entre OH y COV (un promedio urbano de ellos, Seinfeld y Pandis, 1998). Esto quiere decir que los NO_x tienden a ser removidos del sistema 5.5 veces más rápido que los COV, vía radicales OH. Por lo tanto, si la razón COV/NO₂ es menor a 5.5, el radical OH tenderá a reaccionar con el NO₂, removiendo radicales y retardando la formación de O₃. Por otro lado, si la razón es mayor a este valor, el OH reaccionara preferentemente con los COV, activando la formación de O₃. En general, al incrementar las razones de mezcla de COV habrá más O₃, mientras que si se incrementan los

NO_x se podría producir más o menos O₃ en función de la razón COV/ NO_x; por lo tanto, no dependerá simplemente de la razón de mezcla de NO_x presente en el sistema.

Tabla 17. Listado de COVs considerados en el análisis de razón COV/ NO_x

| | |
|------------|---------------------|
| HC3 | Alcanos C3 – C5 |
| HC5 | Alcanos C6 – C8 |
| HC8 | Otros alcanos |
| ETH | Etano |
| OLT | Alquinos terminales |
| OLI | Alquinos internos |
| TOL | Tolueno |
| XYL | Xileno |

Previo al análisis propiamente tal de los resultados de la simulación, son calculadas las razones entre COV y NO_x desde los inventarios locales de emisiones de Santiago, para cada hora del día, mostrado en la figura 41, considerando como COV las trazas incluidas en la tabla 17. Por su parte, los NO_x son considerados como la suma del NO y NO₂.



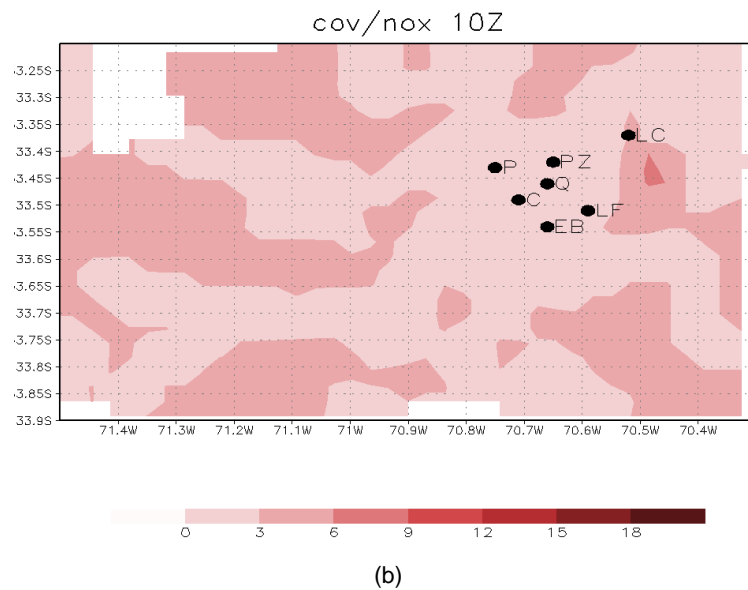


Figura 41. Razón COV/NO_x del inventario de emisiones de Santiago, a) correspondiente a las 07 horas UTC (4 horas local, izquierda) y b) correspondiente a las 10 horas UTC (7 horas local).

En la figura 41 se observan las razones COV/ NO_x en el área geográfica cubierta por el inventario local de emisiones de Santiago, donde los puntos indican la ubicación de las estaciones de monitoreo del área urbana propiamente tal. Las horas del día consideradas en la figura 41 pueden ser consideradas como correspondientes al estado inicial de los precursores, para un día cualquiera. En la figura se observan razones COV/ NO_x que no superan los 6, especialmente en la figura de las 07 horas UTC (04 horas local), mientras que en la figura de las 10 horas UTC se observan razones COV/ NO_x aún menores, sobretodo en el área urbana, producto del aumento de emisiones de NO por el inicio del tráfico vehicular diario. Al oriente de la ciudad, en las cercanías de las estaciones LC y LF, se aprecian valores levemente mayores de COV/ NO_x, producto que dichas estaciones se encuentran relativamente alejadas de la zona centro de la ciudad, donde el tráfico vehicular es mayor. La dependencia de la producción potencial de O₃ es usualmente representada con un diagrama de isopletas de la traza, el cual ilustra la máxima razón de mezcla posible en función de la cantidad inicial de COV y NO_x. El diagrama a utilizar es el desarrollado por Jeffries y Crouse, 1990, el cual fue creado para la ciudad de Atlanta; sin embargo, puede ser utilizado como una referencia para lo esperable respecto a producción fotoquímica en la ciudad de Santiago.

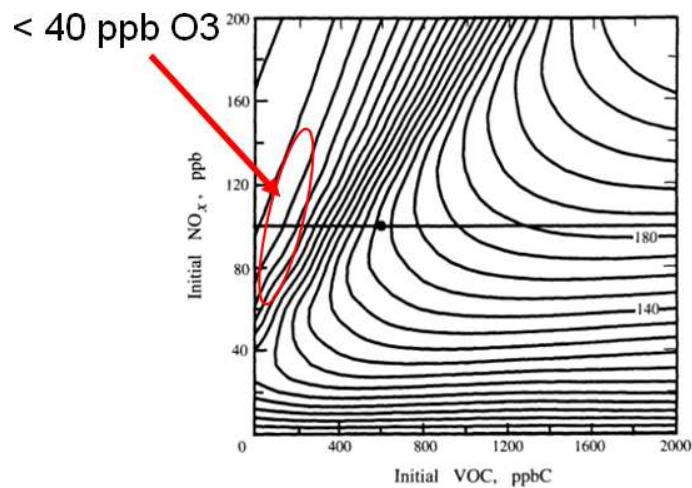


Figura 42. Isopletas de O₃ en función de la razón COV/NO_x, desarrollada por Jeffries y Crouse, 1990.

En la figura 42 se destaca en rojo el área que representa una razón COV/ NO_x igual y menor a 6, como la obtenida en los inventarios. El diagrama indica los valores de O₃ esperados para Santiago, los cuales debieran ser menores a 40 ppb. Esta razón COV/ NO_x obtenida para la Santiago parece ser baja respecto a estimaciones hechas para otras áreas urbanas. En Arriaga-Colina *et al*, 2004, por ejemplo, se obtuvo una razón para el área urbana de Ciudad de México de aproximadamente 20. La causa de esta baja razón COV/ NO_x del inventario de Santiago podría estar dada por una sobrestimación de NO_x, en alrededor de 2 o 3 veces (comunicación personal Laura Gallardo).

En resumen, la aparente baja razón COV/NO_x de los inventarios de emisiones de Santiago debería traducirse en valores simulados subestimados de O₃ respecto a los observados.

5.3 Resultados de simulación fotoquímica – NO_x

Se comparan los resultados modelados tanto de monóxido de nitrógeno (NO) como de dióxido de nitrógeno (NO₂) para las estaciones de Pudahuel, Cerrillos y Las Condes, que son de las que se disponen datos observados (figura 43).

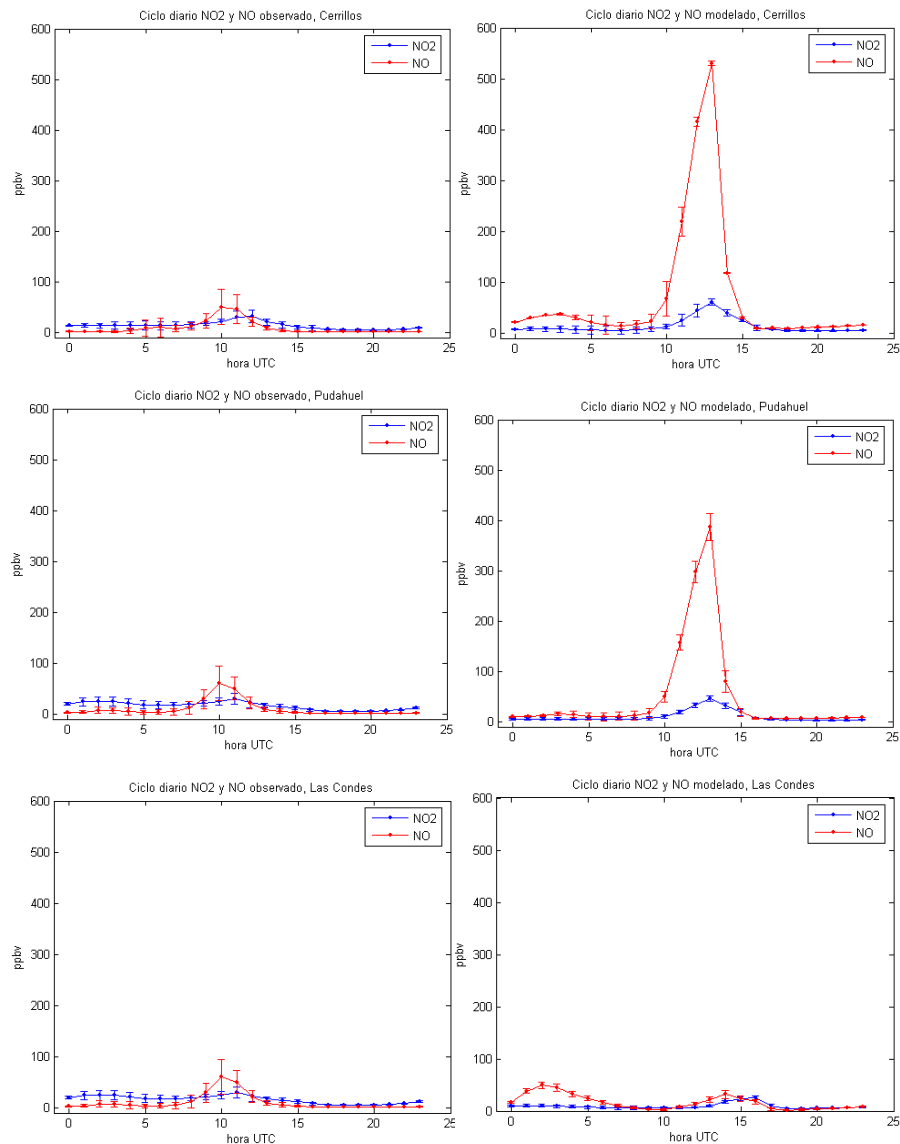


Figura 43. Ciclos diarios medios de NO y NO₂ para Cerrillos, Pudahuel y Las Condes observados (paneles izquierdos) y modelados por CCATT-BRAMS (paneles derechos). Simulación entre el 3 y 12 de enero de 2002. Datos observados de NO₂ son inferidos a través de mediciones de NO.

Los ciclos diarios medios observados y simulados muestran grandes diferencias en las razones de mezcla de NO, especialmente en las primeras horas del día, donde las estaciones de Cerrillos y Pudahuel presentan una sobrestimación de la traza, llegando a ser hasta 10 veces

mayor el valor modelado respecto al observado. Por su parte, en Las Condes no se observa dicha sobrestimación.

Por el contrario, se observa en la figura que la razón de mezcla de NO₂ observada y modelada presentan magnitudes comparables entre sí, por lo que la discrepancia de la cantidad de NO_x observación-modelo sólo está dada por el exceso de NO en el segundo.

Analizando nuevamente las razones de mezcla de NO, las mayores diferencias en ciclo diario observado/modelado se producen alrededor de la hora del máximo diario, esto es en las primeras horas de la mañana. Esta discrepancia podría ser atribuible a 2 causas: la primera podría obedecer a un exceso de emisiones de NO en el inventario local de emisiones (Alcafuz, 2008, Schmitz, 2007, Gallardo, 2010, comunicación personal); mientras que la segunda causa podría estar relacionada con una reducción exagerada de la capa de mezcla a primeras horas del día por parte del modelo, lo cual reduciría el volumen de distribución de la traza como fue mencionado en la sección 4.7.3, donde en varias estaciones se presentaban los máximos diarios de CO sobrestimados; y considerando que gran parte del NO es emitido por el tráfico vehicular al igual que el CO (Schmitz, 2007), podría hacerse un razonamiento análogo en este sentido.

Las consecuencias de esta sobrestimación del NO en el modelo tienen que ver principalmente con un probable exceso en la titulación del O₃ en el mismo, vía la ecuación 5:



Dicha titulación debería ser más importante en las primeras horas del día (entre las 11 y 13 horas UTC, 8 y 10 horas local), donde se observan las mayores discrepancias en las cantidades de NO observadas y modeladas (figura 44).

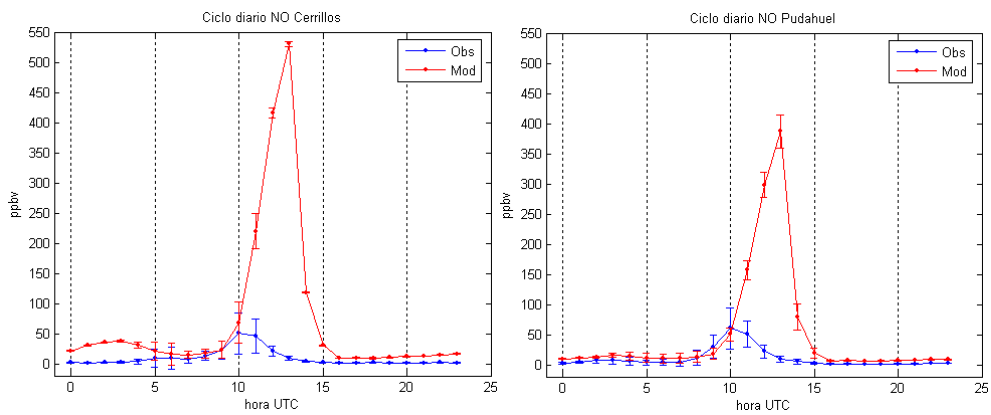


Figura 44. Ciclo diario de razones de mezcla de NO observadas y simuladas, para Cerrillos y Pudahuel.

Por lo tanto, en las estaciones de Cerrillos y Pudahuel podría esperarse que la pendiente de la curva de O_3 modelado sea más suave que la observada mientras los efectos de la titulación sean considerables; pero, posteriormente, la tasa de crecimiento simulada debería ser mayor, producto del descenso del NO en el sistema.

5.4 Resultados de simulación fotoquímica – O₃, comportamiento temporal

A continuación se hará una comparación de los valores observados y modelados de O₃ para el periodo en estudio (3-12 enero de 2002). Se toman las series de tiempo y se calculan los ciclos diarios promedios. En primer lugar, se analizarán los resultados de las estaciones ubicada en la zona occidente y centro de la ciudad (figura 45), que se ubican cercanas a los máximos de emisiones urbanas en Santiago, principalmente las referidas a fuentes móviles.

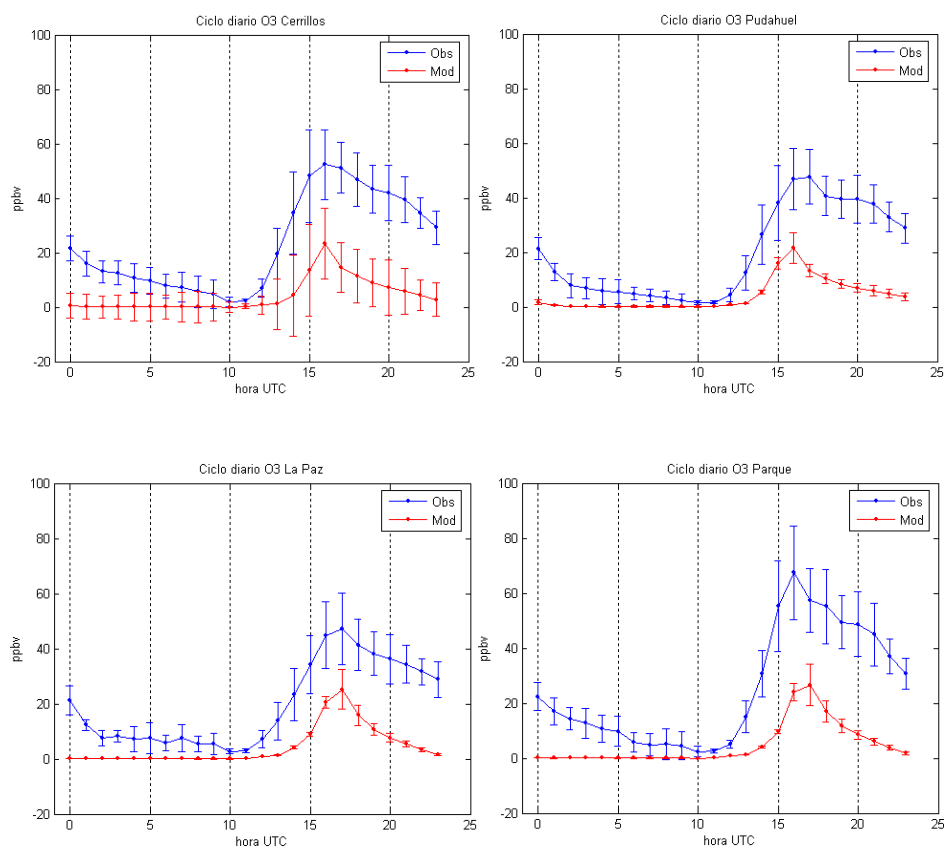


Figura 45. Ciclo diario razones de mezcla de O₃, observadas y modeladas por CCATT-BRAMS, para estaciones ubicadas en la zona centro y occidente de Santiago.

La figura 45 muestra en todas las estaciones máximos modelados de O₃ subestimados, siendo entre 2 y 3 veces menor que los observados, aunque se aprecia coincidencia en la hora de ocurrencia entre ambos ciclos. Respecto a la forma de la curvas, se aprecia que al comenzar la formación de O₃, la tasa de crecimiento de la traza es mucho menor en el modelo que en las observaciones, lo que ocurre entre las 10 y 14 horas UTC. Como se supuso anteriormente, esto podría deberse a la sobrestimación en el modelo de NO en el mismo periodo, que induciría a

una excesiva titulación de O_3 , frenando su tasa de crecimiento. Posteriormente, entre las 14 y 17 horas UTC, las tasas de crecimiento del O_3 modelado se asemejan más a las observaciones. Después del máximo de O_3 , el decrecimiento de la razón de mezcla de la traza tiende a ser similar entre modelo y observación, hasta las 00 horas UTC. Finalmente en la noche, el modelo no es capaz de reproducir el descenso gradual del O_3 observado, ya que los valores se van abruptamente a cero desde las 00 horas UTC en adelante. Esto podría deberse al descenso repentino de la capa de mezcla en el modelo, producto del cambio entre condiciones atmosféricas inestables diurnas y la estabilidad nocturna dada por el enfriamiento radiativo presente. También podrían influir los procesos nocturnos de destrucción del O_3 , principalmente a través del radical hidroxilo (ecuación 6) e hidroperoxilo (ecuación 7) vía:



En segundo lugar, se muestran los ciclos diarios observados y modelados de O_3 para las estaciones de El Bosque, La Florida y Las Condes, ubicadas en la zona oriente de la ciudad y que están menos expuestas a los máximos de emisión vehicular de la zona centro (figura 46).

A pesar que para las 3 estaciones el modelo subestima el máximo de O_3 diario, dicha diferencia no es tan marcada como lo apreciado para las estaciones del centro – occidente de la ciudad. La causa del particular comportamiento de las estaciones del oriente de la ciudad puede deberse a que éstas se encuentran menos afectadas por el efecto de titulación excesiva de O_3 , producto que dicha zona no está tan expuesta a las emisiones vehiculares, en especial las de NO. Además esta última traza es simulada en la misma magnitud a la observación, tal como fue mostrado en la figura 43, para la estación de Las Condes.

Respecto a la forma del ciclo diario, de igual modo que en las estaciones de la zona centro-occidente (figura 45), las estaciones del oriente inicialmente muestran una tasa modelada de crecimiento del O_3 con una pendiente más suave que la observada, lo cual prontamente se ajusta para alcanzar máximos de razón de mezcla de la traza, que en magnitud son comparables a los observados. Para la noche, en las estaciones de la zona oriente, al igual que las ubicadas en el centro-occidente, los valores modelados de O_3 son prácticamente cero.

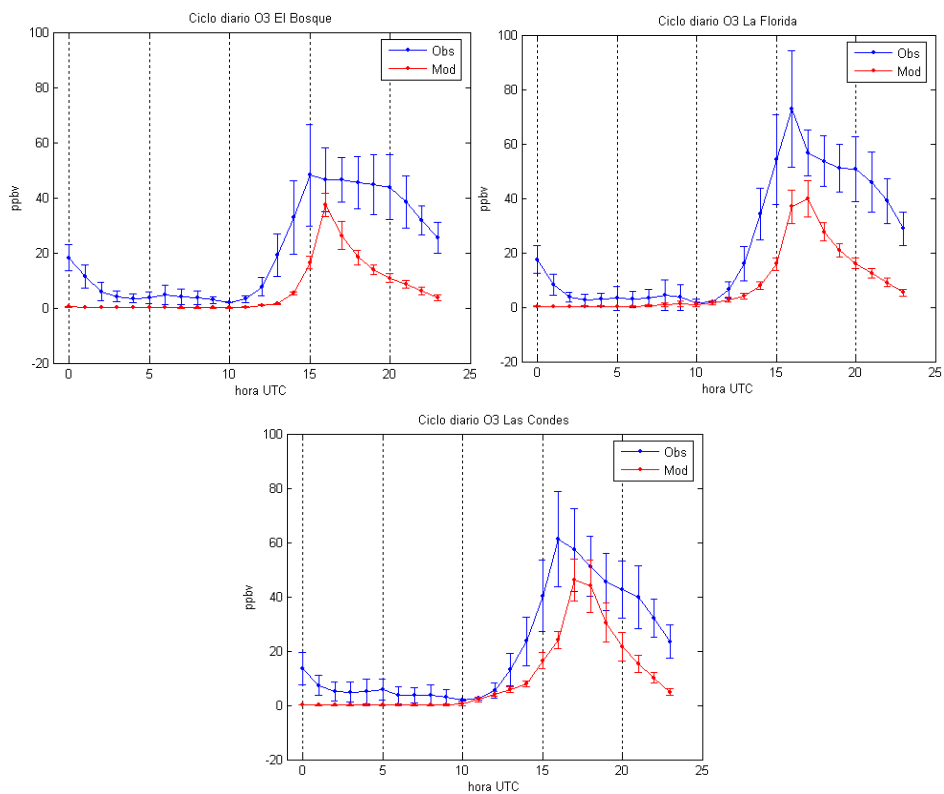


Figura 46. Ciclo diario razones de mezcla de O_3 , observadas y modeladas por CCATT-BRAMS, para estaciones ubicadas en la zona oriente de Santiago.

Por otro lado, es conveniente revisar el comportamiento de la serie de tiempo observada y modelada de alguna estación, para observar alguna característica que no haya sido posible detectar en los ciclos diarios medios, producto del filtro implícito que implica el procedimiento. Para esto y como ejemplo, se analizará la serie de tiempo de la estación de Las Condes.

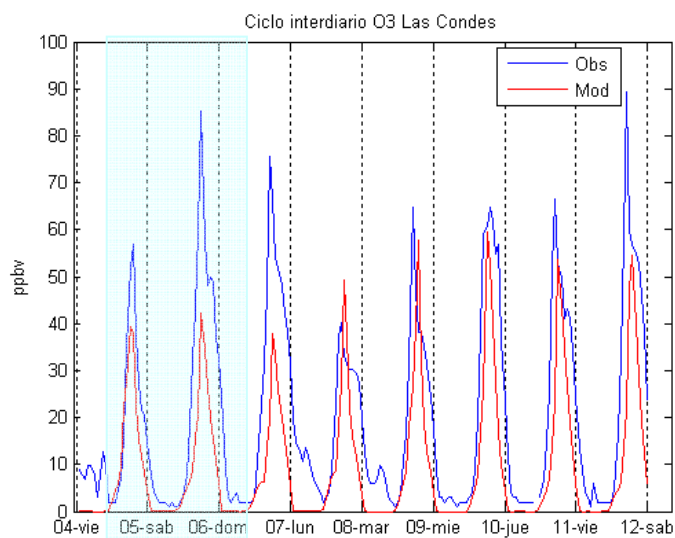


Figura 47. Serie de tiempo razón de mezcla de O_3 observada y modelada. Se destaca en azul claro los días correspondientes a fin de semana.

Una de las características apreciable de la serie observada en la figura 47 es la forma que presenta la curva de O_3 en algunos días, donde se evidencia la aparición de un segundo máximo posterior al principal (por ejemplo los días 5, 7, 9, 10), lo cual fue explicado en Rappengluck, 2000 por el efecto de hidrocarburos biogénicos como los isoprenos; aunque en estudios posteriores dicho máximo fue más bien atribuido al efecto de hidrocarburos antropogénicos, debido a las bajas tasas de emisión de isoprenos presentes en horas de la tarde, producto de la menor radiación solar (Rappengluck *et al*, 2005).

Otro aspecto a destacar es la diferencia observada en la magnitud de las razones de mezcla de O_3 observadas y modeladas los fines de semana (días marcados en azul claro). En el inventario local de Santiago no se consideran diferencias interdiarias en la emisión, por lo tanto un día de semana será considerado en forma similar a un fin de semana, lo cual claramente no se condice con la realidad. Esto puede explicar las diferencias del O_3 entre lo observado-modelado los fines de semana, donde el modelo subestima de manera considerable.

Para conocer el comportamiento interdiario de las razones de mezcla de O_3 , se realiza una evaluación de los máximos diarios del periodo simulados (8 días), entre los datos obtenidos por CCATT-BRAMS y los observados para las estaciones de la red MACAM (tabla 18). Los resultados de la tabla muestran que el error cuadrático medio es menor en las estaciones del oriente, como El Bosque y Las Condes, mientras que tiende a ser mayor en las estaciones ubicadas en la zona centro-occidente de la ciudad, como Parque, Cerrillos y La Florida, aunque esta última es una excepción, por pertenecer al sector oriente de Santiago. Por su parte también fue estimado el BIAS, como la sumatoria de lo pronosticado dividido por la sumatoria de lo observado por cada estación; si este valor es uno, la magnitud de lo pronosticado y lo observado es similar, si es menor a uno los valores pronosticados subestiman respecto a lo observado, mientras que si es mayor a uno ocurre lo contrario, esto es el modelo sobrestima. Como se aprecia en la tabla 18, para todas las estaciones el modelo subestima las magnitudes del máximo de O_3 , aunque dicha subestimación es menor para las ubicadas en la zona oriente como Las Condes, El Bosque y La Florida; mientras que las estaciones con mayor subestimación son Cerrillos, Parque y Pudahuel.

Tabla 18. Evaluación máximos diarios de O₃ del modelo CCATT-BRAMS

| | BIAS | RMSE |
|------------|------|------|
| El Bosque | 0,7 | 22,9 |
| Cerrillos | 0,4 | 38,8 |
| Pudahuel | 0,4 | 31,0 |
| Parque | 0,4 | 46,4 |
| Las Condes | 0,7 | 25,2 |
| La Florida | 0,6 | 38,9 |
| La Paz | 0,6 | 26,2 |

Ahora, si se repite el procedimiento estadístico, pero considerando los promedios móviles cada 8 horas, metodología similar a la que es utilizada para estimar la excedencia de la norma diaria de las observaciones de O₃ (Decreto supremo N°112/02, Ministerio Secretaria General de la Presidencia de la República), se obtienen los coeficientes de correlación, BIAS y RMSE. Esta forma de cálculo produce un mayor sesgo del modelo (BIAS), producto que en éste se simulan muchas horas con valores cercanos a cero, lo cual baja la magnitud del promedio (tabla 19).

Por su parte, según la tabla 19, las más altas correlaciones son observadas en las estaciones de Cerrillos y Parque. Se eligió estimar la correlación con los datos promedio de 8 horas, con el objeto de filtrar las variaciones de alta frecuencia.

Tabla 19. Evaluación máximos diarios de O₃ del modelo CCATT-BRAMS, promedios móviles de 8 horas.

| | Correlación | BIAS | RMSE |
|------------|-------------|------|------|
| El Bosque | 0,38 | 0,4 | 28,8 |
| Cerrillos | 0,55 | 0,2 | 35,8 |
| Pudahuel | 0,19 | 0,3 | 31,1 |
| Parque | 0,57 | 0,3 | 40,2 |
| Las Condes | 0,35 | 0,5 | 22,9 |
| La Florida | 0,36 | 0,4 | 32,7 |
| La Paz | -0,27 | 0,5 | 28,0 |

Entonces, tanto para el análisis de los datos horarios como para los promediados, el modelo subestima la magnitud del ozono en todas las estaciones, mostrando las estaciones un error promedio de 30 ppbv y coeficientes de correlación que van entre 0.2 y 0.6 (excepto La Paz, donde la correlación es negativa).

5.5 Resultados de simulación fotoquímica – O₃, comportamiento espacial

Para estudiar el comportamiento espacial de las razones de mezcla de O₃, se obtuvieron valores medios para cada hora del día (figura 48), utilizando la simulación fotoquímica generada.

En la figura 48 se muestran los resultados en las horas donde la traza presenta un comportamiento más activo, lo cual ocurre durante el día. A las 12 horas UTC (9 horas local, figura 48-a) se observan valores de O₃ menores a 10 ppb en la área de Santiago, mientras que al oriente de la zona urbana existen razones de mezcla de la traza entre 10 y 20 ppb, siendo éstas probablemente remanente del O₃ transportando durante el día anterior y que no es titulado debido a la ausencia de emisiones de NO en la zona, que corresponde a la cordillera de Los Andes. En la imagen de las 16 horas UTC (13 horas local, figura 48-b) se aprecia en forma activa la producción fotoquímica de O₃ en el modelo, reflejada en altos valores de la traza, principalmente viento abajo de la zona urbana, siendo además notable el efecto de titulación en la zona urbana y por donde pasa la pluma de contaminantes, que es transportada por el viento predominante en dicha hora. Finalmente a las 20 horas UTC (17 horas local, figura 48-c), se observa la zona urbana con relativamente bajas razones de mezcla de O₃, probablemente producto del máximo vehicular vespertino de NO que titula O₃, mientras aún persisten altos valores en la zona precordillera y cordillerana, llegando los máximos incluso hasta 4000 metros de altitud.

Sin embargo hay que considerar que, dada la sobrestimación del viento que CCATT-BRAMS presenta (sección 4.5.2), podrían haber indicios que este transporte de O₃ hacia la cordillera estaría sobrestimado en el modelo.

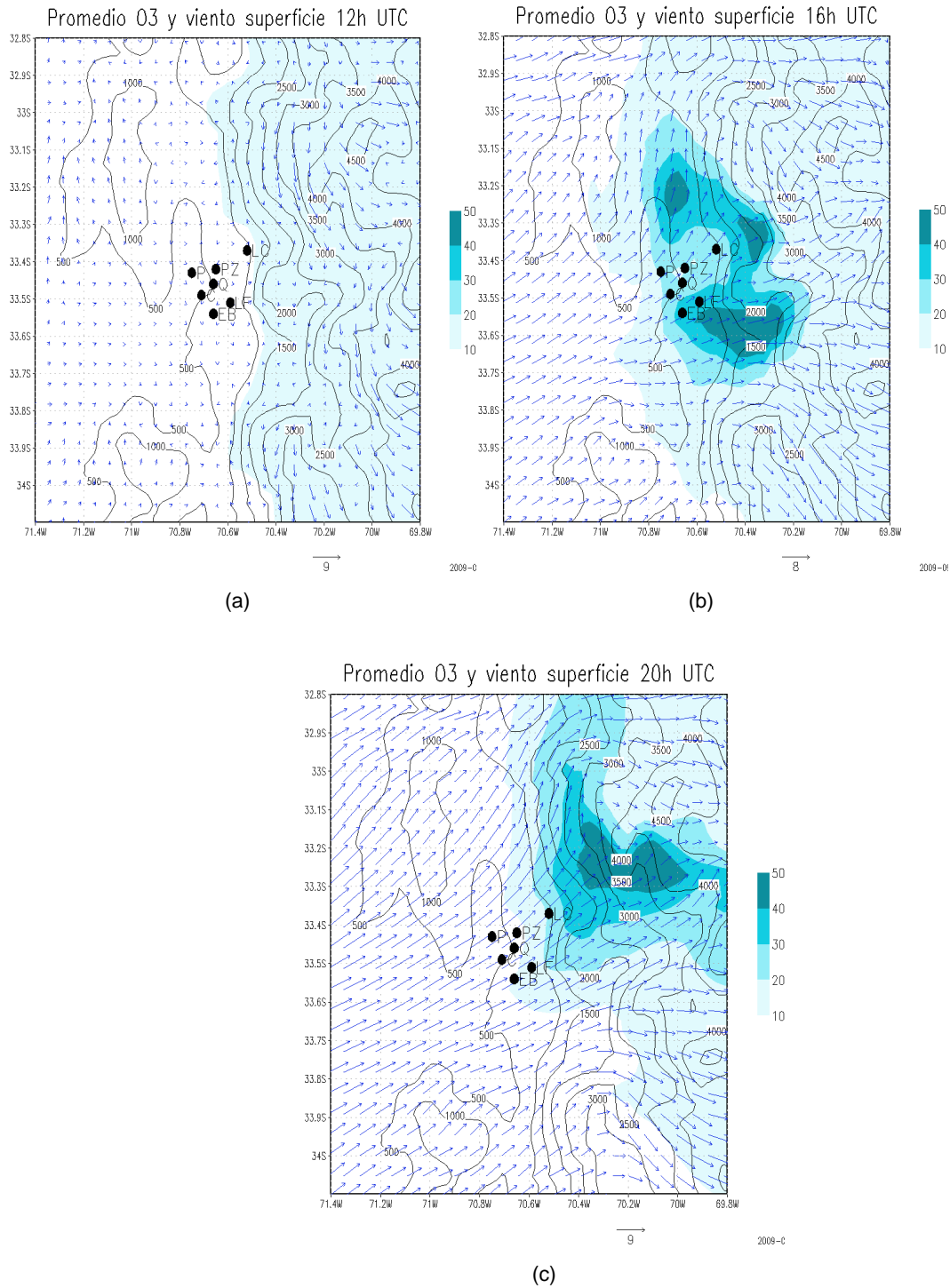


Figura 48. O₃ (ppb) y campo de viento superficial modelada por CCATT-BRAMS.

Sin embargo, en 2001 el Centro Nacional del Medioambiente (CENMA) realizó una campaña de mediciones meteorológicas y de calidad de aire en diversos puntos de la Región Metropolitana, entre ellos en el sector de La Parva, ubicado aproximadamente en los -33.3 grados sur y -70.3 grados oeste y a una altitud de 2800 m.s.n.m, en plena cordillera de Los Andes. Las mediciones tomadas para O₃ (marzo de 2001, figura 49) muestran altos valores de la traza, llegando a alcanzar incluso máximos de casi 100 ppb. Esto muestra que es posible encontrar altos valores de O₃ en la alta cordillera, tal como los resultados de CCATT-BRAMS muestran en la figura 48.

Por otro lado, el comportamiento nocturno del ozono (Anexo 10) muestra una disminución de la traza, especialmente en el área urbana, dada por la ausencia de la producción fotoquímica sumada al efecto de titulación vía NO_x y el radical nitrato. Las figuras en dicho anexo consideran el despliegue del ozono en escala logarítmica, lo cual permite ver mejor dicho comportamiento. Sin embargo, para las horas de máximo ozono, incluidas en la figura 48, se considera una escala lineal, esto para ver de mejor forma la magnitud y ubicación de los máximos valores.

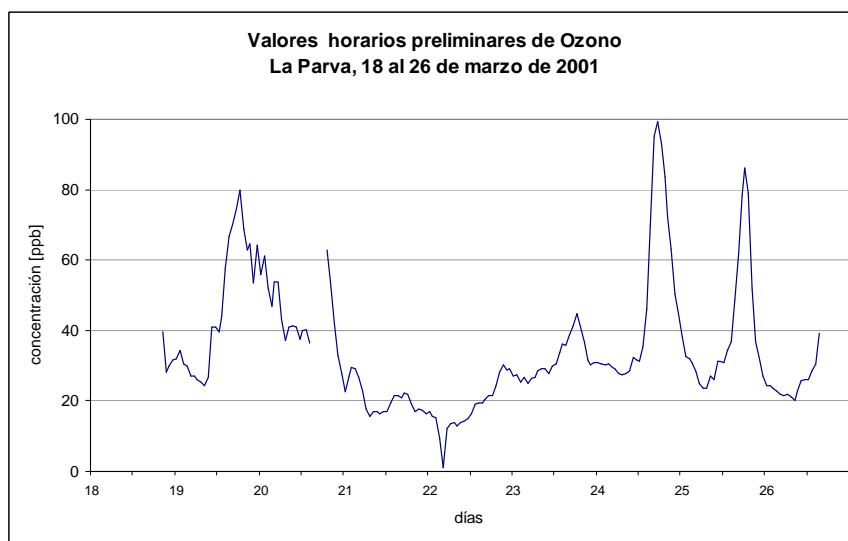


Figura 49. O₃ (ppb) observado en mediciones hechas en La Parva, cordillera de Los Andes (comunicación personal, Manuel Merino, CENMA).

5.6 Resultados de simulación fotoquímica – O₃, comparación de resultados con otros modelos corridos en Chile central

En esta sección, los resultados para O₃ de CCATT-BRAMS serán comparados con los obtenidos por otros sistemas de modelamiento para el área urbana de Santiago, que hayan utilizado el inventario oficial de emisiones de la ciudad y que tengan documentado de alguna

forma los resultados obtenidos. La comparación será realizada con los resultados de WRF-CHEM (Schmitz, 2007) y POLYPHEMUS-MM5 (Alcafuz, 2007).

En Schmitz 2007 se realiza una simulación con WRF-CHEM utilizando el inventario local de emisiones de Santiago en su forma original, entre el 30 de octubre y el 1 de noviembre de 2002, con la cual se comparan los resultados obtenidos en el modelo con las observaciones de O_3 y otras especies obtenidas desde una campaña fotoquímica documentada en Rappengluck *et al* 2005. El dominio de mayor resolución de la corrida presentaba 3 kilómetros de resolución, mientras que el primer nivel vertical estaba a 16 metros sobre la superficie. La comparación indicó que el O_3 modelado se subestimó, entre 2 y 3 veces, en todas las estaciones comparadas respecto a la razón de mezcla máxima diaria observada, siendo una de las causas atribuidas al sesgo en el O_3 modelado las bajas razones COV/ NO_x presentes del inventario local, respecto a las encontradas en la literatura. Para mejorar los resultados, las proporciones COV/ NO_x del inventario fueron modificadas hasta encontrar una razón que permitiese la formación de O_3 en el modelo, lo cual involucró una disminución de los NO_x y un aumento de los COV. Sólo posterior a este ajuste, el modelo simuló valores de O_3 entorno a los observados.

Por su parte, en Alcafuz 2007 se mostraron los primeros resultados para razones de mezcla de O_3 obtenidas por MM5-POLYPHEMUS, corriendo con 3 dominios, con 4 kilómetros de resolución horizontal para el dominio más fino y con el primer nivel vertical a 15 metros; se consideró, además, el inventario local de emisiones original. Con esto, se simularon valores de O_3 para la estación de Pudahuel aproximadamente 5 veces menor al valor constatado en la estación de monitoreo. Además, el modelo simulaba un máximo diario en la noche, probablemente como respuesta a las condiciones iniciales y de borde utilizadas por este modelo (MOZART). Posteriormente, en Alcafuz 2009, se presentan resultados para O_3 de MM5-POLYPHEMUS con el inventario modificado para COV y NO_x de manera similar a lo hecho por Schmitz 2007, los cuales muestran un menor error que los obtenidos con el inventario original.

Comparando los resultados de CCATT-BRAMS con los de los trabajos expuestos anteriormente se puede decir que, si bien el O_3 modelado es menor al observado, el modelo no subestimó dichas razones de mezcla en la magnitud de lo mostrado por WRF-CHEM y MM5-POLYPHEMUS. Vale hacer notar que la comparación de resultados para los 3 modelos se hace tomando las simulaciones que utilizaron el inventario en forma original. Tanto en el caso de MM5-POLYPHEMUS y CCATT-BRAMS el esquema químico utilizado fue el mismo (RACM), mientras que en WRF-CHEM el escogido fue RADM (Stockwell *et al*, 1990). En este sentido,

dada la poca especiación presente en el inventario utilizado en las tres experiencias, la diferencia de resultados no debiera estar en función del mecanismo químico elegido.

En Lin *et al* 2009 se identifican como uno de los principales mecanismos responsables del comportamiento del O₃ en un modelo la resolución utilizada (horizontal y vertical) y la capacidad de titulación del O₃ por NO_x del mismo.

Respecto al espaciado entre puntos de grilla en los modelos, tanto en CCATT-BRAMS, WRF-CHEM y MM5-POLYPHEMUS los dominios de mayor resolución horizontal que utilizan son comparables entre sí (entre 3 y 4 kilómetros). Sin embargo, la resolución vertical de los modelos es distinta, al menos la de CCATT-BRAMS respecto a los otros. Tanto WRF-CHEM como MM5-POLYPHEMUS presentan el primer nivel vertical aproximadamente a 20 metros, mientras que CCATT-BRAMS lo ubica a 80 metros.

Esta menor resolución del espaciado vertical puede producir en el modelo una dilución artificial del NO_x superficial, lo cual llevaría a una menor titulación del O₃, reduciendo por lo tanto su consumo en esta reacción (Lin *et al* 2009). Por lo tanto, esta podría ser la causa de la menor subestimación del O₃ en CCATT-BRAMS respecto a los otros 2 modelos. Este efecto también fue encontrado en Jiménez *et al* 2005, trabajo en el cual fueron corridos 2 modelos con distintas cantidades de niveles verticales, obteniéndose como resultado mayores valores de O₃ y menores de NO_x en el modelo de menor resolución y resultados opuestos para un modelo con mayor resolución. De la misma forma, en Menut *et al*, 2005, se simulan mejor los máximos diarios de O₃ utilizando en modelo químico CHIMERE - forzado con datos del modelo global ECMWF - que respecto a usar el mismo modulo químico, pero forzado meteorológicamente por el modelo de mesoescala RAMS, en donde en este último se subestiman de manera significativa los máximos diarios.

Por otro lado, se debe considerar la sobrestimación de la temperatura modelada en CCATT-BRAMS y su efecto sobre la formación de O₃ en el modelo. En forma general, estudios previos han determinado una fuerte dependencia entre máximos diarios observados de temperatura y máximos diarios de O₃, correlacionadas ambos en forma positiva (Schmitz, 2007). Por lo tanto, si el modelo es consistente con esta relación empírica, que es explicada por la dependencia de las tasas de reacción a la temperatura, y dado que el modelo sobrestima los máximos de temperatura (sección 4.3), deberá tender a sobrestimar los máximos de O₃ simulado. Esto también podría influir sobre la menor subestimación del O₃ en CCATT-BRAMS, respecto a WRF-CHEM y MM5-POLYPHEMUS.

En suma, los resultados de ozono de CCATT-BRAMS muestran una subestimación de la traza respecto a lo observado, siendo una de las causas el exceso de NO_x en el inventario, lo cual produciría una sobre-titulación. Sin embargo, dichos resultados no son tan bajos en magnitud como los mostrados en MM5-POLYPHEMUS y WRF-CHEM (usando ambos el inventario sin modificar), lo cual puede explicarse por la menor resolución vertical de CCATT-BRAMS respecto a los otros dos, que podría producir una dilución artificial del NO_x por dicho efecto, por ende una atenuación del exceso del mismo dado originalmente por el inventario de emisiones, por lo tanto un menor efecto de sobre-titulación.

5.7 Conclusiones

- Se infiriere el comportamiento fotoquímico de esta implementación de CCATT-BRAMS, previo a la simulación, en función de la evaluación de las variables meteorológicas modeladas. En el caso de la temperatura, como el modelo presenta una sobrestimación de la variable, se deduce que, por este factor, la producción de O_3 podría también ser sobrestimada.
- Las razones COV/NO_x del inventario local de emisiones presentan bajos valores, en comparación a los reportados en otras áreas urbanas, probablemente por exceso de NO_x . Por lo tanto, las razones de mezcla de O_3 esperadas, en función de los diagramas de Jeffries y Crouse, debieran ser menores a las observaciones de la traza en las estaciones de monitoreo.
- Usando el inventario de emisión local en su forma original, los máximos diarios de las razones de mezcla modeladas de O_3 se presentan subestimadas en todas las estaciones, aunque no en la magnitud observada en las simulaciones hechas por otros sistemas como WRF-CHEM y MM5-POLYPHEMUS. Esto podría deberse al menor efecto de titulación de O_3 , producto que la menor resolución vertical del primer nivel de CCATT-BRAMS, respecto a los otros modelos, podría producir una dilución artificial de NO que reduciría dicha titulación, dado el aparente exceso de dicha traza en el inventario de emisiones original. Otra causa de la menor subestimación de los máximos de O_3 en los resultados de CCATT-BRAMS podría ser el efecto compensatorio de una posible sobreproducción fotoquímica por efecto de la sobrestimación de las temperaturas superficiales en el modelo.

- Respecto al ciclo diario del O_3 , en todas las estaciones se observa que la pendiente de la tasa de crecimiento simulada es menor a la observada, en especial en las primeras horas del día. Esto podría deberse al exceso en la razón de mezcla matinal de NO presente en la simulación, que tendría efecto sobre la titulación exagerada del O_3 . Dado que el NO (al igual que el CO) presentó sobrestimación en el máximo de las razones de mezcla matinales, probablemente este aspecto sea perfectible ajustando el comportamiento de la altura de la capa límite, lo cual corregiría la sobrestimación de NO, por ende la sobretitulación matinal modelada de O_3 .
- Los patrones de distribución espacial de las razones de mezcla de O_3 en la cuenca de Santiago parecen ser razonables, ya que presentan los máximos en la zona oriente de la ciudad. Sin embargo, parece ser que la pluma de O_3 podría estar sobre-desplazada al oriente, dado que la magnitud del viento se presenta sobrestimada en el modelo. Respecto al comportamiento nocturno, se aprecia menores valores de ozono justo sobre el área urbana, lo cual indica el efecto de titulación mayor producto del NO_x presente, respecto a las zonas aledañas menos afectas a emisiones antrópicas.

6 Conclusiones finales

- Se logra determinar una configuración espacial de los dominios usados en las simulaciones, que permite representar las principales características sinópticas y de mesoescala presentes en la zona central del país y en especial sobre la cuenca de Santiago, los cuales además cuentan con una resolución espacial que permite definir adecuadamente características locales, como la topografía. Se espera que esta configuración sea de utilidad en el marco del trabajo futuro a desarrollar con CCATT-BRAMS en el país. Por otro lado, se debe trabajar en pos de aumentar la resolución vertical del modelo, en especial en los niveles cercanos a superficie, lo cual no fue posible lograr en este trabajo por problemas de inestabilidad numérica de las simulaciones.
- Los resultados de la implementación de CCATT-BRAMS en Chile son capaces de simular las principales características meteorológicas y de dispersión de contaminantes, presentes en la zona central del país en el periodo estival, donde fueron realizadas las pruebas. Sin embargo, se debe proseguir trabajando para mejorar deficiencias aún existentes en la configuración física del sistema, que producen sesgos en los resultados modelados, por ejemplo, en variables tales como la temperatura y la humedad superficial. Por otro lado, se debe apuntar a aumentar la resolución del modelo, tanto horizontal como vertical, lo cual permitirá mejorar características tales como la representación orográfica y a su vez la simulación del campo de viento.
- La distribución temporal y espacial media de las razones de mezcla de CO y viento durante el día es representada por el modelo en concordancia a lo mostrado en trabajos previos y las observaciones disponibles para la zona en estudio. A pesar de ello, es encontrada una sobrestimación de los máximos diurnos en algunas estaciones y problemas con los valores nocturnos, siendo las discrepancias atribuidas a problemas en la evolución de la capa límite planetaria modelada y a la incerteza de las emisiones nocturnas que contiene el inventario. Será interesante determinar, a través de alguna campaña de medición, si determinados comportamientos encontrados en las simulaciones, tales como los máximos relativos simulados de CO en la alta cordillera, son verificables o sólo son resultados del modelo.

- Usando el inventario de emisión local en su forma original, los máximos diarios de las razones de mezcla modeladas de O_3 se presentan subestimadas en todas las estaciones, por efecto de un inventario COV limitado, aunque dicha subestimación no presenta la magnitud observada en otras simulaciones llevadas a cabo con el mismo inventario. Esto podría deberse al menor efecto de titulación de O_3 producto de la menor resolución vertical del primer nivel de CCATT-BRAMS (dilución), así como al efecto compensatorio de una posible sobreproducción fotoquímica, por efecto de la sobrestimación de las temperaturas superficiales en el modelo. Por su parte, los patrones de distribución espacial de las razones de mezcla de O_3 en la cuenca de Santiago parecen ser razonables, ya que presentan los máximos en la zona oriente de la ciudad.
- Finalmente, con este trabajo se entrega validada preliminarmente una nueva herramienta implementada localmente, que podrá ser útil tanto en la comprensión de la problemática de la calidad de aire tanto en Santiago, como posteriormente con fines operativos.

7 Trabajo posterior

Es imprescindible contar con el modelo CCATT-BRAMS completamente operativo en algún centro de cómputo de Chile, en función de realizar algún trabajo posterior con el mismo. Actualmente existe una persona con dedicación exclusiva, en el Centro de Modelamiento Matemático de la Universidad de Chile, trabajando en la implementación del modelo, lo cual será muy significativo en orden a realizar algún desarrollo futuro.

Gran parte las simulaciones para esta tesis fueron hechas en CPTEC, Brasil; sin embargo, las pruebas realizadas con el modelo fueron insuficientes para ajustar el modelo de mejor forma, por lo cual se requiere un trabajo futuro importante en este sentido. En este sentido, uno de los aspectos importantes de ajustar en CCATT-BRAMS seguirá siendo el encontrar un factor de humedad inicial de suelo apropiado respecto a los flujos energéticos superficiales que se supone que existen sobre Santiago en verano. Esta línea de trabajo probablemente permitirá mejorar los errores en las estimaciones de temperatura y de humedad superficial, así como la representación de la capa límite en el modelo. Sin embargo, existe la limitación de no contar con datos observados de, por ejemplo, calor sensible, calor latente y altura de capa de mezcla, aunque la reciente adquisición del equipo LIDAR por parte de la Dirección Meteorológica de Chile permitirá tener una aproximación medida de la variación de la capa límite atmosférica, lo cual permitirá contrastar las observaciones con los datos modelados, no sólo de CCATT-BRAMS sino que para cualquier modelo operando sobre la zona central de Chile.

Por otro lado, sería interesante realizar un estudio para ver el comportamiento del modelo en condiciones invernales, tanto para evaluar variables meteorológicas como tiempo químico.

En el modelamiento químico, tanto para CO como para O₃ se presentaron altos valores de las trazas en la zona cordillerana, incluso mayores que en el área urbana, donde se ubican las principales emisiones. Sería interesante determinar, a través de alguna campaña de medición, si estos máximos en la alta cordillera son verificables o sólo son resultados ficticios del modelo.

8 Bibliografía

- Alcaful, R., Mallet, V., Roustan, Y. and MENA, M., 2008. Operational chemical weather forecasting at the Chilean Weather Service. Poster presentado en IGAC 10th International Conference. Bridging the scales in Atmospheric Chemistry : Local to Global to 12 September 2008 in Annecy, France.
- Alcaful, R. 2007. Validación del sistema de pronóstico químico y de calidad de aire POLYPHEMUS. Informe de la tarea K.6 Anexo "A" de la directiva anual de actividades 2007 de la Dirección General de Aeronáutica Civil.
- Alcaful, R. 2009. Verificación del funcionamiento del pronóstico operacional de ozono POLYPHEMUS. Informe N°1, interno, Dirección General de Aeronáutica Civil.
- Andreae, M. O., D. Rosenfeld, P. Artaxo, A. A. Costa, G. P. Frank, K. M. Longo, and M. A. F. Silva-Dias. Smoking rain clouds over the Amazon, *Science*, V. 303, 1337-1342, 27 Feb 2004.
- Arriaga-Colina, J.L., Jason West, J., G. Sosa, S.S. Escalona, R.M. Ordúñez, A. Cervantes. 2004. Measurements of VOCs in Mexico City (1992–2001) and evaluation of VOCs and CO in the emissions inventory. *Atmospheric Environment* 38 2523–2533
- Blake D., and F. S. Rowland, Urban Leakage of Liquefied Petroleum Gas and Its Impact on Air Quality in Mexico City, 1995. *Science*, 953.
- Cavalcanti, I. F. A., and Coauthors, 2002: Global climatological features in a simulation using the CPTEC-COLA AGCM. *J. Climate*, 15, 2965–2988.
- Chen, T.Y., I. J. Simpson, D. R. Blake, and F. S. Rowland (2001), Impact of the leakage of liquefied petroleum gas (LPG) on Santiago Air Quality, *Geophys. Res. Lett.*, 28(11), 2193-2196.
- CONAMA, 2004. Evolución de la calidad de aire en Santiago 1997/2004. Comisión Nacional del Medio Ambiente, Región Metropolitana. Disponible en http://www.sinia.cl/1292/articles-39731_recurso_1.pdf
- Corvalán R, Osses M, 2002. Hot Emission Model For Mobile Sources: Application To The Metropolitan Region Of The City Of Santiago-Chile, *Journal of the Air & Waste management Association*, 1047-3289(52 (2)): pp. 167 -174, Feb 2002
- Coutts, A., Beringer, J. Tapper, N. 2006. Impact of Increasing Urban Density on Local Climate: Spatial and Temporal Variations in the Surface Energy Balance in Melbourne, Australia *Journal of Applied Meteorology and Climatology* Article: pp. 477–493
- Deardorff, J.W., 1980: Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model, *Boundary Layer Meteorol.*, 18, 495-527.
- Elsorbany, Y., Kleffmann, J., Kurtenbach, R., Rubio, M., Lissi, E., Villena, G., Gramsch, E., Rickard, A., Pilling, M., and Wiesen, P. 2009. Summertime photochemical ozone formation in Santiago, Chile. *Atmospheric Environment* Volume 43, Issue 40, December 2009, Pages 6398-6407.
- FAO 1995. Global and National Soils and Terrain Digital Database (SOTER) - Procedures Manual. FAO World Soil Resources Reports No.74, Rev.1. Rome.
- Freitas, S. R., Longo, K. M., Silva Dias, M., Silva Dias, P., Chatfield, R., Prins, E., Artaxo, P., Grell, G., and Recuero, F.: Monitoring the transport of biomass burning emissions in South America, *Environmental Fluid Mechanics*, doi:10.1007/s10652-005-0243-7, 5 (1-2), 135-167, 2005.
- Freitas S. R., Longo, K. M., Silva Dias, M., Chatfield R., Andreae M. O., Artaxo P., Grell G., Fazenda A., Rodrigues L. F., Panetta J.: The Coupled Aerosol and Tracer Transport model to the Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System. 1: model description and evaluation, 2009. *Atmospheric Chemistry and Physics*, volume 9, number 8, pages 2843-2861.
- Gallardo, L., 2006. Trazas atmosféricas y su modelación. Capítulo 4, en *Contaminación atmosférica urbana: episodios críticos de contaminación ambiental en la ciudad de Santiago*, Morales et al (Eds). Editorial Universitaria.
- Gallardo, L., G. Olivares, J. Langner, B. Aarhus, 2002. Regional dispersion of oxidized sulfur in Central Chile. *Atmospheric Environment* 36 (2002) 3819–3828.
- Gallardo, L., Olivares, G., Aguayo, A., Langner, J., Aarhus, B., Gidhagen, L., 2000. Regional Dispersion of Oxidized Sulfur over Central Chile Using the HIRLAM - MATCH System. Strengthening of the Air Quality Information System (Working area 2): Application of a regional-scale model over the central part of Chile. First Advancement Report. National Commission for the Environment. Disponible en : <http://www.dim.uchile.cl/~lgallard/S disp/HIRLAM-MATCH/hirlam match jan1998.pdf>
- Garratt, J. 1992. *The atmospheric boundary layer*. Cambridge University Press.
- Garreaud R., y J. Rutllant, 2006: Variabilidad atmosférica de alta frecuencia en el borde oriental del anticiclón del Pacífico sureste. *Revista Chilena de Ciencia y Tecnología del Mar*, 29(1), 5-13.

- Garreaud, R., J. Rutllant and H. Fuenzalida, 2002: Coastal lows in north-central Chile: Mean structure and evolution. *Mon. Wea. Rev.*, 130, 75-88.
- Gevaerd, R., and Freitas, S. R.: Estimativa operacional da umidade do solo para iniciação de modelos de previsão numérica da atmosfera. Parte I: Descrição da metodologia e validação, *Revista Brasileira de Meteorologia*, 21, 3, 1-15, 2006.
- Gohm, 2005. Modeling of Alpine Atmospheric Dynamics II. Alexander Gohm, IMG1, University of Innsbruck. Disponível em http://img1.uibk.ac.at/mmetgroup/rams/MAAD_SS2005/MAAD_SS2005_U4.pdf
- Gramsch, E., Cereceda-Balic, F., Oyola, P., Von Baer, D., 2006. Examination of pollution trends in Santiago de Chile with cluster analysis of PM10 and ozone data. *Atmospheric environment*, September 2006 vol.40, issue 28, page 5464-5475.
- Grell, G.A. and D. Devenyi, 2002: A generalized approach to parameterizing convection combining ensemble and data assimilation techniques, *Geoph. Res. Lett.*, 29, NO 14., 10.1029/2002GL015311, 2002.
- Grell GA, SE Peckham, R Schmitz, and SA McKeen, G Frost, WC Skamarock, and B Eder. 2005. "Fully coupled 'online' chemistry within the WRF model." *Atmos. Environ.*, 39:6957-6976.
- Grell, G. A., J. Dudhia and D. R. Stauffer, 1994: A description of the fifth-generation Penn State/NCAR mesoscale model (MM5). NCAR Technical Note, NCAR/TN-398+STR, 117 pp.
- Grell, G. A., R. Knoche, S. E. Peckham, and S. A. McKeen (2004), Online versus offline air quality modeling on cloud-resolving scales, *Geophys. Res. Lett.*, 31, L16117, doi:10.1029/2004GL020175.
- Horowitz, L. S. Walters, and D. L. Mauzerall, et al., 2003: A global simulation of tropospheric ozone and related tracers: description and evaluation of MOZART, version 2. *Journal of Geophysical Research*, 108(D24), 4784, doi:10.1029/2002JD002853.
- Jeffries, H.E., and R.Crouse (1990) "Scientific and Technical Issues Related to the Application of Incremental Reactivity," report prepared for Western States Petroleum Association, Glendale, CA, September 17.
- Jorquera, H. y Castro, J, 2009. Analysis of urban pollution episodes by inverse modeling, *Atmospheric environment*, 44 N° 1, 42-54.
- Kalanda, B., Oke, T., Spittlehouse, D. 1980. Suburban energy balance estimates for Vancouver, B.C., using the Bowen ratio-energy balance approach. *American meteorological society*.
- Kalnay, E., M. Kanamitsu, R. Kistler, W. Collins, D. Deaven, L. Gandin, M. Iredell, S. Saha, G. White, J. Woollen, Y. Zhu, A. Leetmaa, R. Reynolds, M. Chelliah, W. Ebisuzaki, W. Higgins, J. Janowiak, K. Mo, C. Ropelewski, J. Wang, R. Jenne, and D. Joseph, 1996: The NCEP/NCAR 40-Year Reanalysis Project. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, 77, 437-471.
- Levy, J. I., Chemerynski, S. M., Sarnat, J., 2005. Ozone Exposure and Mortality: An Empiric Bayes Metaregression Analysis. *Epidemiology: Official Journal of the International Society for Environmental Epidemiology* 16(4), 458 – 468.
- Liang, Xin-Zhong, Min Xu, Jinhong Zhu, and K.E. Kunkel. 2005. "Development of the Regional Climate-Weather Research and Forecasting Model (CWRF): treatment of topography." *Sixth WRF/Fifteenth MM5 User's Workshop, National Center for Atmospheric Research, June 27-30, 2005*. Boulder, CO : NCAR, Paper 9.3, 5 p.
- Lin, M., T. Holloway, T. Oki, D. G. Streets, and A. Richter (2009). Multi-scale model analysis of boundary layer ozone over East Asia. *Atmos. Chem. Phys.*, 9, 3277-3301.
- Longo, K. M., Freitas S. R., Pirre M., Marécal V., Rodrigues L. F., Alonso M., Mello R., 2010. The Chemistry-CATT BRAMS model: a new efficient tool for atmospheric chemistry studies at local and regional scales. In the process of submission to *Geoscientific Model Development*.2010a
- Longo, K M ; Freitas, S. R. ; Andreae, M. O. ; Setzer, A ; Prins, E. M. ; Artaxo, P. . The Coupled Aerosol and Tracer Transport model to the Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System (CATT-BRAMS) Part 2: Model sensitivity to the biomass burning inventories.. *Atmospheric Chemistry and Physics (Online)*, v. 10, p. 5785-5795, 2010b.
- Longo, K. M.; Freitas, S. R.; Silva Dias, M.A.F. Dias, P. Silva Dias. Numerical modeling developments towards a system suitable to a real time air quality forecast and climate changes studies in South America. *Newsletter of the International Global Atmospheric Chemistry Project, Taiwan*, v. 33, p. 12-16, 2006.
- Mallet, V., Quélo, D., Sportisse, B., Ahmed de Biasi, M., Debry, É., Korsakissok, I., Wu, L., Roustan, Y., Sartelet, K., Tombette, M., and Foudhil, H.: Technical Note: The air quality modeling system Polyphemus, *Atmos. Chem. Phys.*, 7, 5479-5487, 2007.
- Marengo, J. A., and Coauthors, 2003: Assessment of regional seasonal rainfall predictability using the CPTEC/COLA atmospheric GCM. *Climate Dyn.*, 21, 459-475.
- Marécal, V., G. Durry, K. Longo, S. R. Freitas, E. Riviere, and M. Pirre, Mesoscale modelling of water vapour in the tropical UTLS: two case studies from the HIBISCUS campaign, *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 6, 8241-8284, 2006.
- Mellor, G.L., and T. Yamada, 1974: A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers. *J. Atmos. Sci.*, 31, 1791-1806

- Mellor, G.L., and T. Yamada, 1982. Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Rev. of Geophysics and space physics*, Vol. 20, n°4. Pages 851-875.
- Menut, L., Coll, I., Cautenet, S. Impact of meteorological data resolution on the forecasted ozone concentrations during the ESCOMPTE IOP2a and IOP2b. *Atmospheric Research* 74 (2005) 139–159
- Mesinger, Janjic, Nickovic, Gavrilov and Deaven, 1988. The step-mountain coordinate: model description and performance for cases of alpine lee cyclogenesis and for a case of an Appalachian redevelopment. *Mon. Wea. Rev.* 116, 1493-1518.
- Monin A, and Obukhov, A, 1954. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. Translation from the original Russian by John Miller for Geophysics Research Directorate, AF Cambridge Research Centre, Cambridge, Massachusetts, by the American Meteorological Society. Contract Number 19(604)-1936. Department of the Army, Fort Detrick. Frederick, Maryland. Translation number 1234, January 1959.
- PPDA, CONAMA-RM. Plan de Prevención y Descontaminación Atmosférica de la Región Metropolitana. Comisión Nacional del Medioambiente, 1997. Disponible en <http://www.conama.cl/rm/568/article-932.html>
- PPDA ACTUALIZACIÓN, CONAMA-RM. Anteproyecto de Revisión, Reformulación y Actualización del Plan de Prevención y de Descontaminación Atmosférica para la Región Metropolitana (PPDA). CONAMA Región Metropolitana, julio de 2008.
- RAMS Technical description. Disponible en http://www.atmet.com/html/docs/rams/rams_techman.pdf
- RAMS topography document. Definitions and Issues with RAMS Topography and the Vertical Grid Structure. Marty Bell, Mike Weissbluth, and Robert Walko. Disponible en <http://www.atmet.com/html/workshop/workshop-4.shtml#32>
- Rappenglück B., Schmitz R., Bauerfeind M., Cereceda-Balic F., v. Baer D., Jorquera H., Silva Y., Oyola P. (2005): An urban photochemistry study in Santiago de Chile, *Atmos. Environ.*, 39, 2913-2931, doi:10.1016/j.atmosenv.2004.12.049
- Rappenglück B., Oyola P., Olaeta I., Fabian P. (2000): The evolution of photochemical smog in the Metropolitan Area of Santiago de Chile, *J. Appl. Meteor.*, 39, 275-290
- Reynolds, R, Rayner, N, Smith, T, Stokes, D and Wang, W, 2002. An Improved In Situ and Satellite SST Analysis for Climate. *Journal of Climate*, Volume 15, Issue 13 (July 2002) pp. 1609–1625
- Rutllant J. and R. Garreaud, 2004: Episodes of strong flow down the western slope of the subtropical Andes. *Mon. Wea. Rev.*, 132, 611-622.
- Saide, P, 2008. Emisiones de monóxido de carbono en Santiago de Chile: Distribución espacial y optimización por modelación inversa. M.Sc. in Mechanical Engineering. Univ. of Chile, Santiago, Chile, available at: http://www.dim.uchile.cl/_psaide/Tesis_MSC_psaide_final.pdf, 2008.
- Schmitz, R. 2005. Modelling of air pollution dispersion in Santiago de Chile. *Atmospheric Environment* 39 (2005) 2035–2047.
- Schmitz, R., Falvey, M. (2007). Diseño de Plan Operacional de Seguimiento de la Calidad del Aire para Ozono Troposférico (O₃) en la Región Metropolitana. Informe Final preparado para CONAMA RM.
- Seinfeld J. H. and Pandis S. N. (1998) *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*, J. Wiley, New York.
- Smagorinsky, J. 1963 "General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiment". *Mon. Weather Rev* volume: 91. pp 99–164.
- Mellor, G.L., and T. Yamada, 1974: A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers. *J. Atmos. Sci.*, 31, 1791-1806
- Stockwell, W.R., Kirchner, F., Kuhn, M. and Seefeld, S., 1997: A New Mechanism for Regional Atmospheric Chemistry Modeling. *J. Geophys. Res.* 102, 25847-25879.
- Stockwell, W. R. , P. Middleton, J. S. Chang, and X. Tang, "The RAD2.0 Chemical Mechanism for Regional Air Quality Modeling," *J. Geophys. Res.*, 95, 16343-16367, 1990.
- Toon, O, Turco, R, Westphal, D, Malone, R, and Liu, M. 1988 A Multidimensional Model for Aerosols: Description of Computational Analogs. *Journal of the Atmospheric Sciences* . Volume 45, Issue 15 (August 1988) pp. 2123–2144.
- Tripoli, G.J., and W.R. Cotton, 1982: The Colorado State University three-dimensional cloud/mesoscale model -- 1982. Part I: General theoretical framework and sensitivity experiments. *J. de Rech. Atmos.*, 16, 185-220.
- Undurraga, A, 2009. Desarrollo de capa de mezcla en Santiago: Análisis observacional y comparación con modelo de mesoescala. Proyecto de tesis para optar al grado de Magíster en Meteorología y Clima, Universidad de Chile.
- Walko, R. L., L. E. Band, J. Baron, T. G. F. Kittel, R. Lammers, T. J. Lee, D. Ojima, R. A. Pielke, Sr., C. Taylor, C. Tague, C. J. Treback, and P. L. Vidale, 2000: Coupled atmosphere-biophysics-hydrology models for environmental modeling. *J. Appl. Meteor.*, 39, 931-944.

Wallace, J. M., S. Tibaldi, and A. J. Simmons, 1983: Reduction of systematic forecast errors in the ECMWF model through the introduction of an envelope orography. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 109, 683-717.

Wilks, D., 1995: *Statistical Methods in the Atmospheric Sciences*. Int. Geophys. Series Vol 59 Academy Press, 467pp.

Anexo 1. Estructura de funcionamiento de CCATT-BRAMS

La estructura de funcionamiento que tiene CCATT-BRAMS es explicada en el esquema de la figura I.

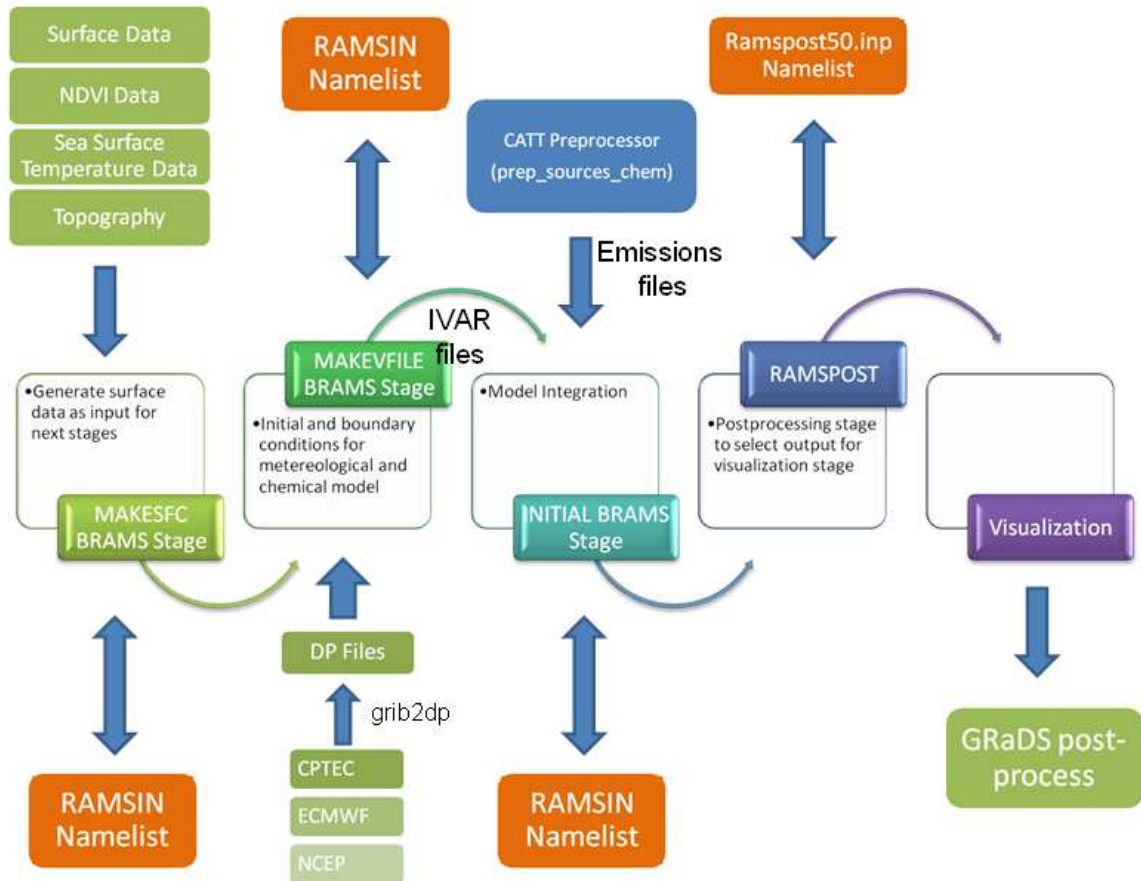


Figura I. Estructura de funcionamiento de sistema CCATT-BRAMS. Facilitada por Rodrigo Delgado, DMC.

El esquema va desde la izquierda a la derecha. En la primera fase, MAKEFC, se determina el número de dominios a utilizar, el tamaño de ellos, el número de puntos y la resolución que los conformarán tanto en la horizontal como en la vertical, el tipo de proyección (polar estereográfica o cartesiana). En base a esto se preprocesan los datos de condiciones de borde superficiales, para generar los datos de entrada para las próximas etapas de funcionamiento del modelo. En esta fase se consideran datos de topografía, temperatura superficial del mar, índice de Vegetación, tipo de suelo y textura de suelo.

En la siguiente etapa, MAKEVFILE, se preprocesan los datos necesarios para condiciones iniciales y de borde meteorológicas y/o químicas. En esta fase se toman los datos de reanálisis o pronósticos meteorológicos (NCEP, ECMWF, CPTEC) y/o datos de condiciones químico-meteorológicas provenientes, por ejemplo del modelo MOCAGE, y se extraen los datos en función de los dominios configurados en la etapa previa, obteniendo como resultados archivos llamados "DP", que son lo que finalmente el modelo lee cuando comienza el proceso de integración propiamente tal.

Posteriormente se debe realizar el preprocesamiento de las emisiones que serán consideradas en la simulación. Dichas emisiones pueden ser las provenientes de bases de datos globales como Edgar y Retro, o las provenientes de inventarios de emisiones locales. En dicho preprocesamiento, y en base a las configuraciones de dominios hechas anteriormente, se generan datos de emisiones que podrán ser leídos por el sistema en el momento de la integración del modelo.

Con los datos generados en las todas las etapas previas, se puede pasar a la etapa de integración del modelo propiamente tal, la que es ejecutada en la fase llamada "INITIAL". El resultado de esta fase es la corrida propiamente tal, donde son generados datos de tipo binario para todos los tiempos de la simulación, para cada dominio configurado y para todas las variables disponibles.

En todas las etapas descritas anteriormente, excepto en el pre-procesamiento de emisiones, la configuración de todas las características de la corrida se realiza a través de un archivo de control llamado RAMSIN, mientras que para el pre-procesamiento de emisiones el archivo de control es llamado prep_sources_chem.

En la última fase, RAMSPOST, se realiza el post-proceso de la simulación obtenida, donde se definen las variables de salida que serán finalmente visualizadas y el tipo de coordenada vertical para la visualización, que puede ser cartesiana o de presión. En esta etapa, todas las modificaciones son manejadas a través de un archivo de control llamado ramspost50.inp

Anexo 2. Situación sinóptica predominante del periodo de simulación

Para hacer una descripción general de la situación sinóptica del periodo, se estudian los reanálisis de NCEP para el periodo de estudio, en particular cartas de presión a nivel medio del mar y de altura geopotencial en 500 hpa para el periodo entre el 05 y el 19 de enero de 2002. Esta descripción será complementada con observaciones de altura geopotencial del radiosonda de Santo Domingo y de nubosidad realizadas en la estación Pudahuel-Aeropuerto.

Periodo del 05 al 12 de enero

A principios del periodo, en superficie se observa un predominio anticiclónico generalizado en niveles bajos de la troposfera desde los 40°S al norte, típico del periodo estival (Figura II). Por su parte, en el mismo periodo se observó el fortalecimiento de una dorsal en altura, lo cual produjo un aumento en la subsidencia, por ende un creciente aumento de las temperaturas en el valle y predominancia de cielos despejados (Figura II-b).

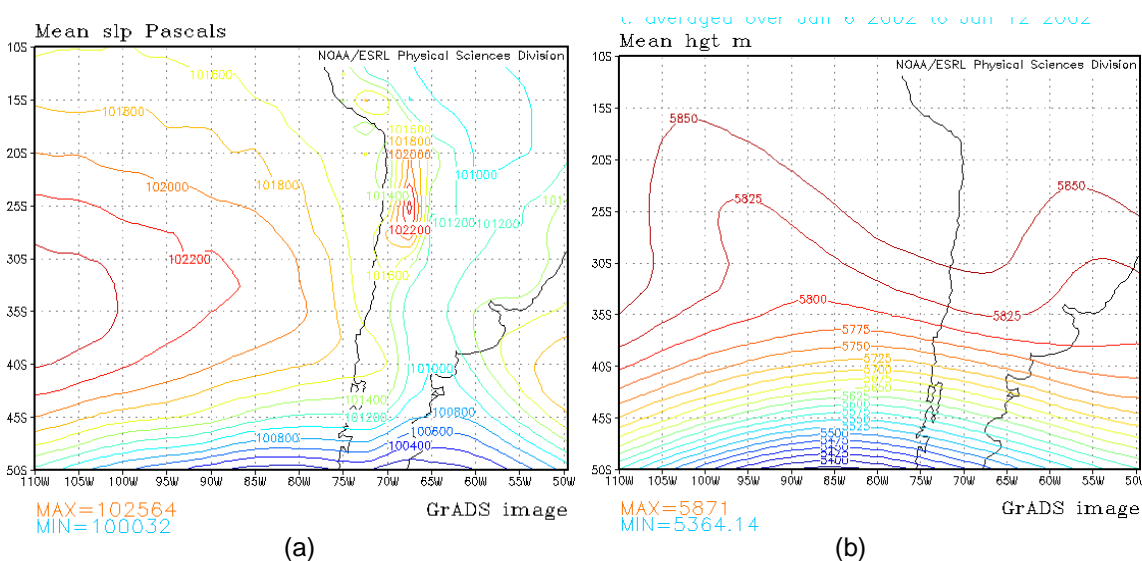


Figura II. (a) Reanálisis promedio entre el 6 al 12 de enero de 2002, presión al nivel medio del mar, (b) reanálisis promedio entre el 06 y 12 de enero de 2002, altura geopotencial en 500 hpa.

Periodo del 13 al 15 de enero

En superficie, el paso de un sistema frontal por la zona sur del país, que debilita levemente las condiciones anticiclónicas en zona central del país, produce un posterior ingreso de una alta presión de origen frío al continente, lo cual produce una configuración típica de vaguada costera en la costa centro-norte del país (figura III-a), favoreciendo la ocurrencia de viento del este en niveles bajos y reduciendo la ventilación, en particular el día 15. Por su parte en 500 hpa, no se

ve la configuración habitual que acompaña a una vaguada costera, ya que en vez de haber una dorsal, prevalece una vaguada sobre la zona central, la cual quedó como remanente de una onda fría que cruzó el país por la zona sur en los días previos (figura III-b).

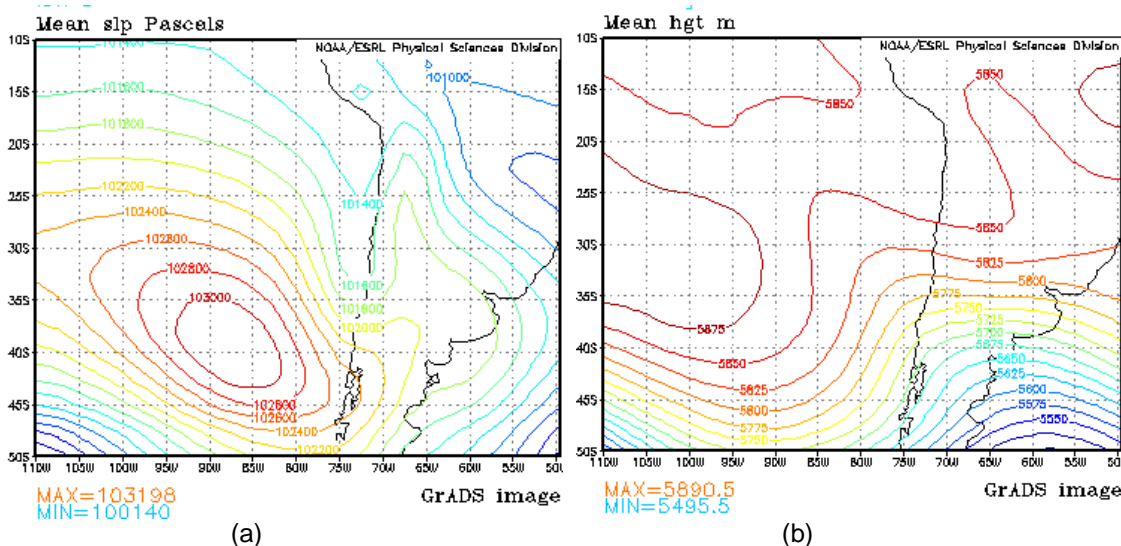


Figura III. (a) Reanálisis promedio entre el 13 al 15 de enero de 2002, presión al nivel medio del mar, (b) reanálisis promedio entre el 13 y 15 de enero de 2002, altura geopotencial en 500 hpa.

Periodo del 16 al 19 de enero

En superficie, se debilita la configuración de vaguada costera, debido al desplazamiento de la alta presión fría hacia el atlántico (figura IV-a), mientras que en 500 hpa se comienza a gestar una baja segregada entorno al remanente de vaguada presente en la zona central del país, la cual sin embargo no alcanza una gran profundización (figura IV-b).

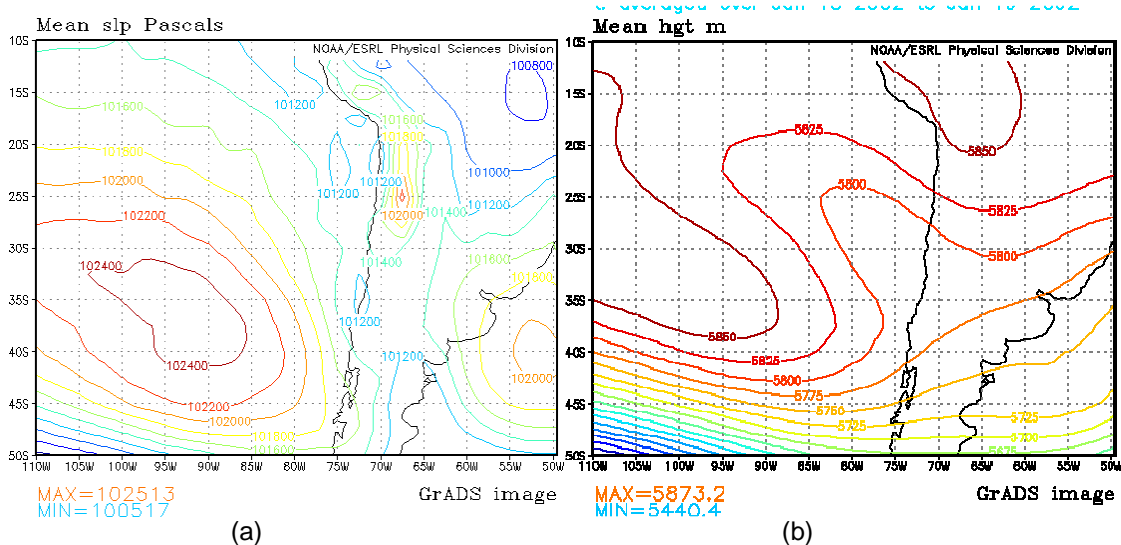


Figura IV. (a) Reanálisis promedio entre el 16 al 19 de enero de 2002, presión al nivel medio del mar, (b) reanálisis promedio entre el 16 y 19 de enero de 2002, altura geopotencial en 500 hpa.

Para complementar este análisis con las observaciones disponibles, en la figura IV se muestran las series de tiempo de altura geopotencial de 850, 700 y 500 hpa extraídas del radiosondeo de Santo Domingo, que a pesar de estar aproximadamente a 100 km al oeste de Santiago, es una buena representación de las condiciones troposfericas de niveles medios y altos de la zona central de Chile. Una mirada general a estas 3 series da cuenta de que las variaciones del geopotencial son más bien suaves, propias del periodo de verano donde las condiciones anticiclónicas son las predominantes. Ahora, observando más en detalle, especialmente las series de 700 y 500 hpa, se puede apreciar algunas de las características sinópticas descritas anteriormente. Desde comienzos del periodo hasta el día 11, el aumento de las alturas geopotenciales en ambos niveles da cuenta de la aproximación y máxima intensidad de la dorsal en altura sobre la zona ese día, para luego mostrar una paulatina disminución hasta fines del periodo analizado. Por su parte, la serie de tiempo de 850 hpa es de comportamiento aún más suave, aunque también alcanza a mostrar la máxima intensidad de la dorsal el día 11.

La figura V indica las condiciones nubosas presentes en el periodo, en base al reporte meteorológico sinóptico realizado diariamente cada 3 horas, en la estación de Pudahuel-Aeropuerto. Como suele suceder en condiciones estivales sobre Santiago, la mayor parte de los días presenta cielos despejados o con escasa nubosidad, siendo relevantes sólo algunas apariciones de nubosidad alta el día 8 y 16. El día 17 se observan indicios de nubosidad baja, lo cual sucede con mayor notoriedad el día 18, entregando el reporte ese día a las 12 horas UTC, 8 octavos de nubes bajas. Esto podría ser debido a una advección de nubosidad y aire proveniente de la costa, fenómeno que ocurre con cierta periodicidad todo el año, dado por el debilitamiento de la subsidencia y la presencia de nubosidad baja en la costa. Dicho debilitamiento de la subsidencia está dado por la presencia de circulación ciclónica en altura (figura IV-b), la cual se manifiesta en la presencia de nubosidad alta el día 18 sobre la estación (figura VI).

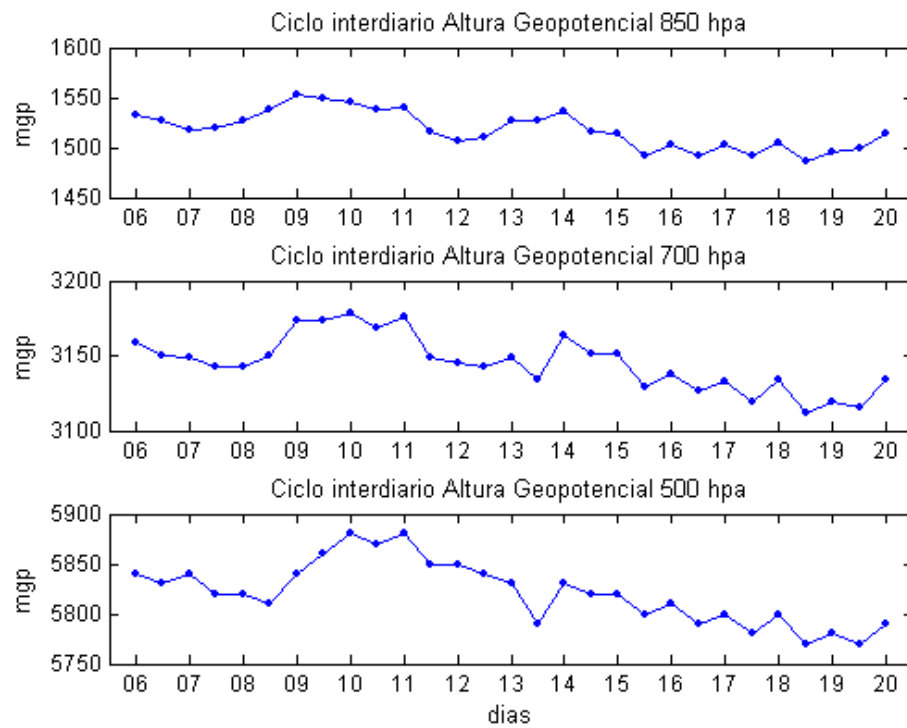


Figura V. Serie de tiempo de altura geopotencial observada en 850 hpa (superior), 700 hpa (medio) y 500 hpa (inferior), radiosonda de Santo Domingo.

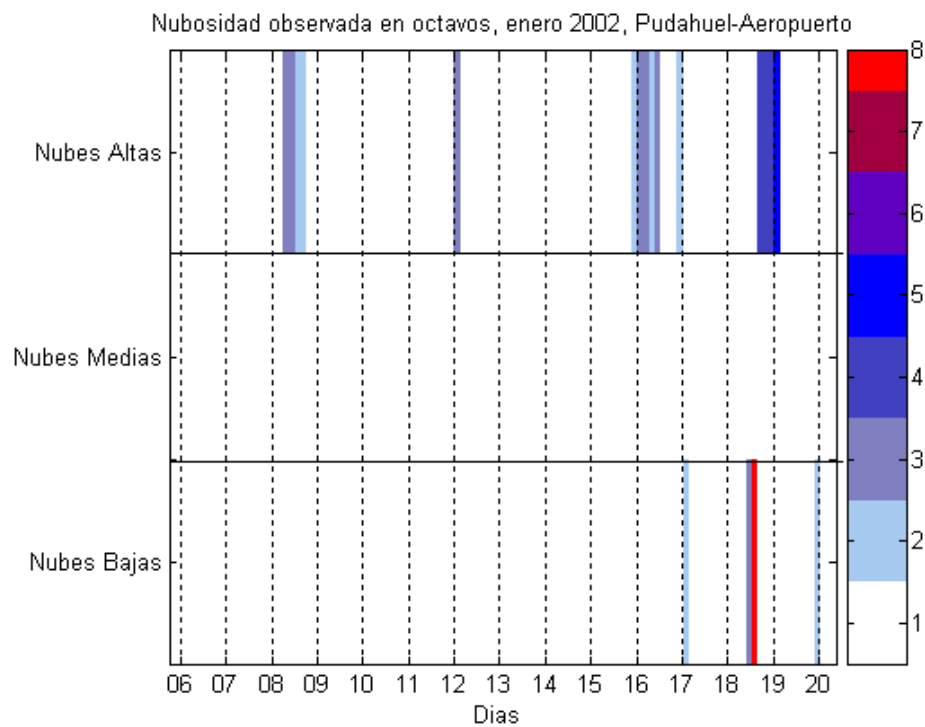
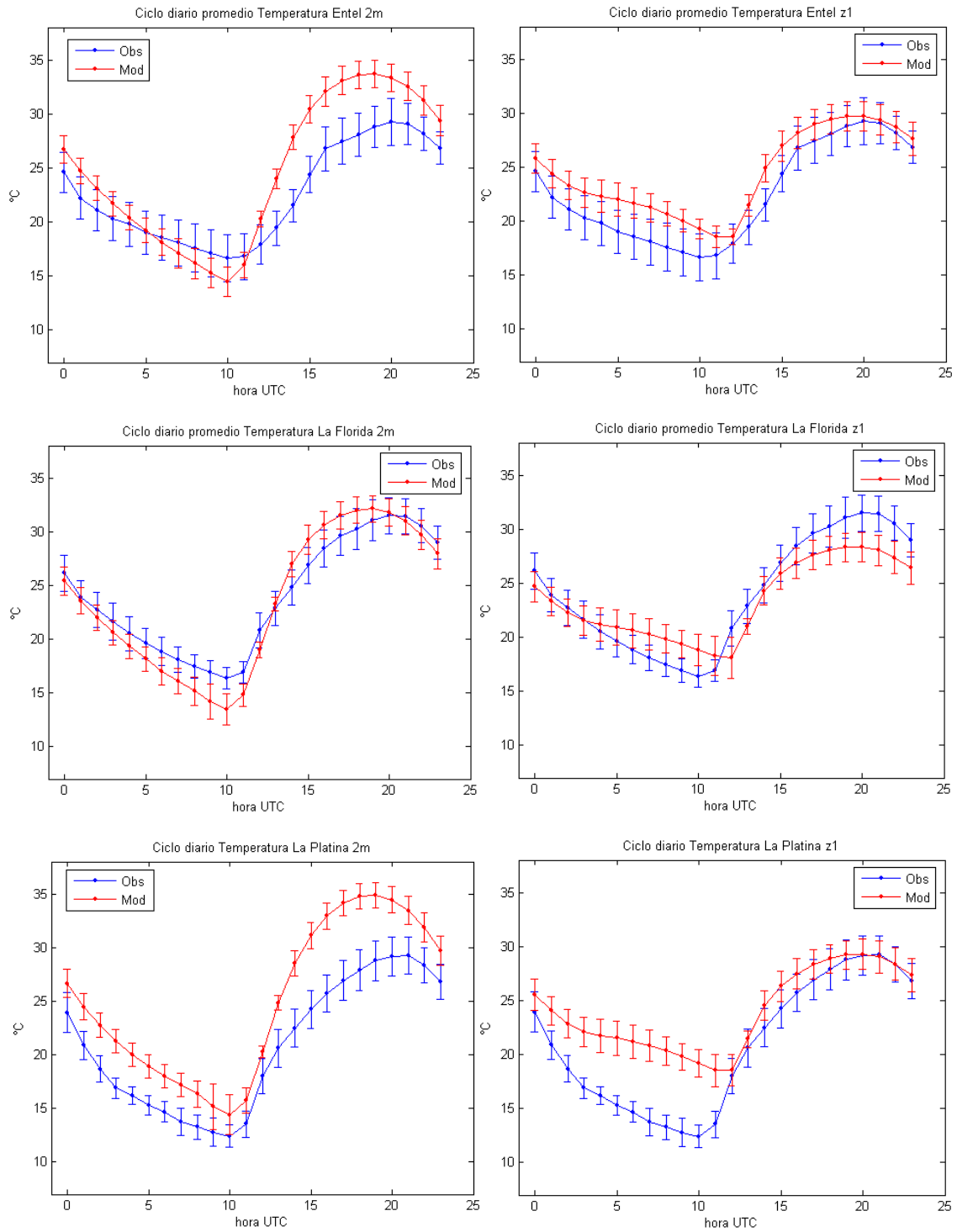
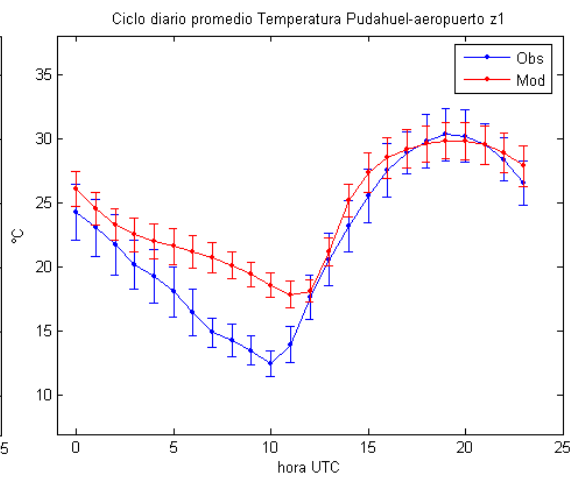
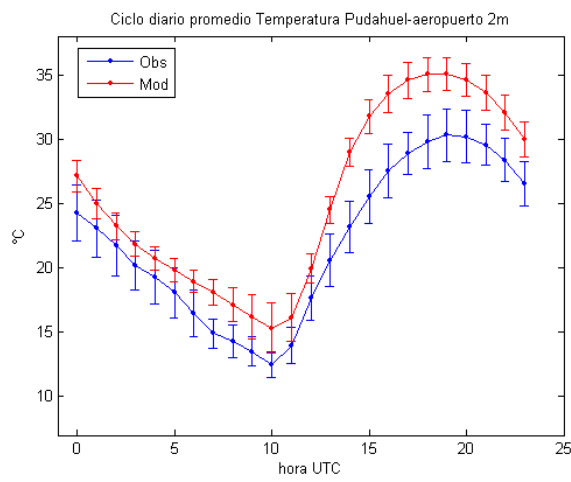
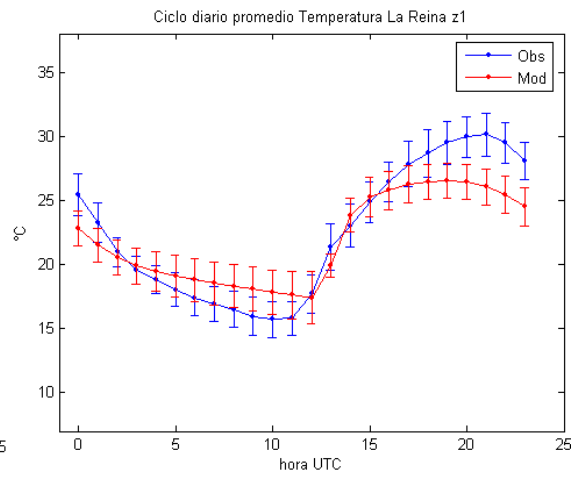
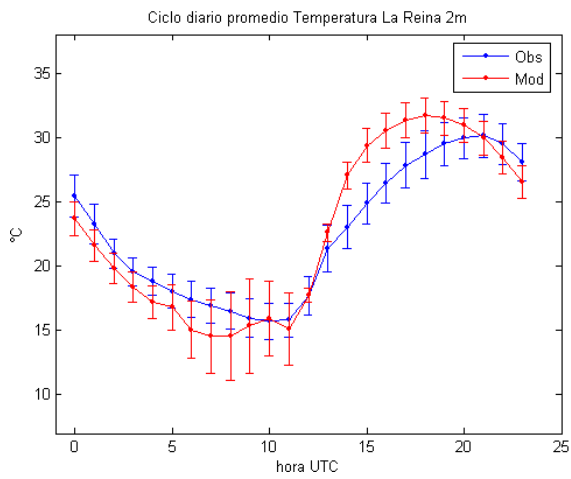


Figura VI. Nubosidad baja, media y alta en octavos, entre el 6 y el 20 de enero de 2002, estación Pudahuel-Aeropuerto.

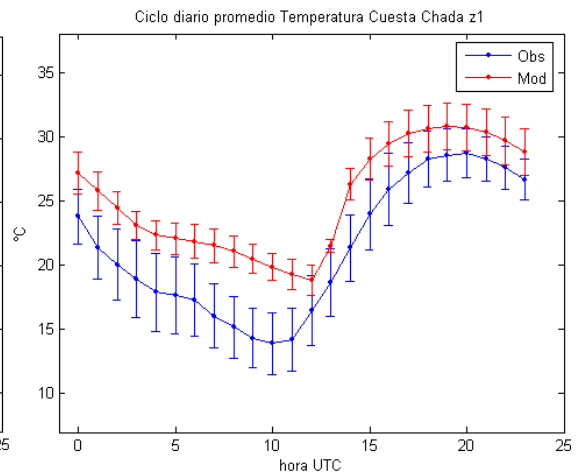
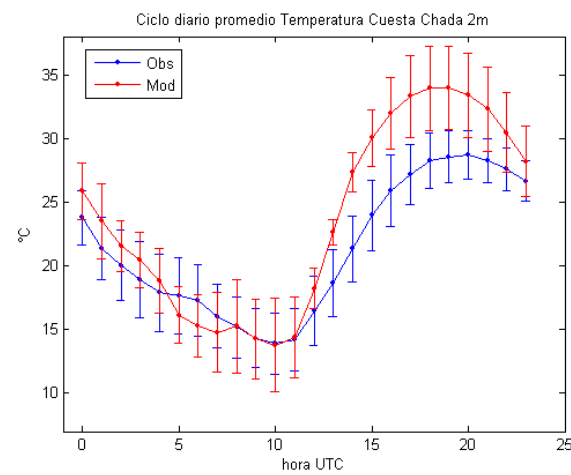
Anexo 3. Ciclos diario observados y modelados de temperatura

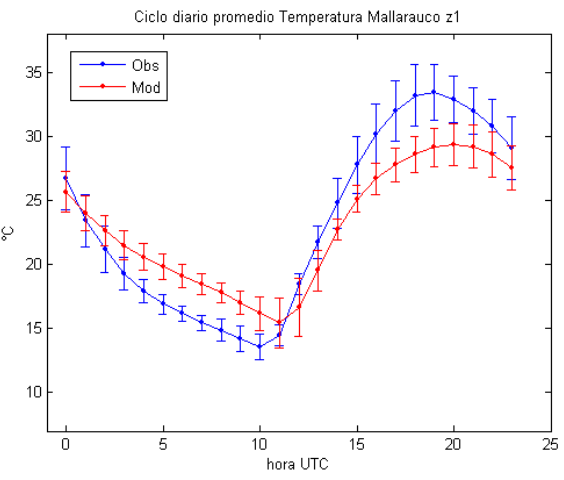
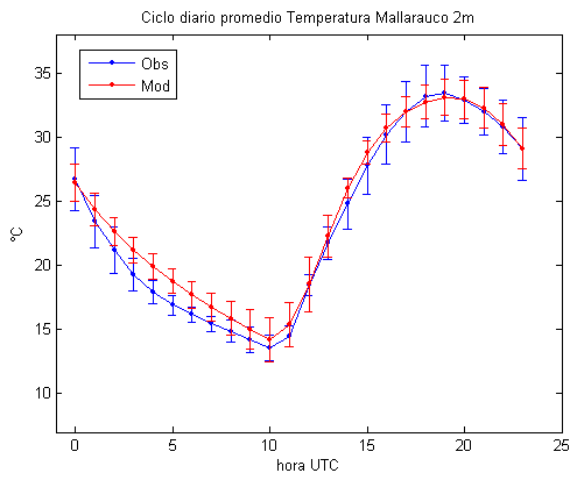
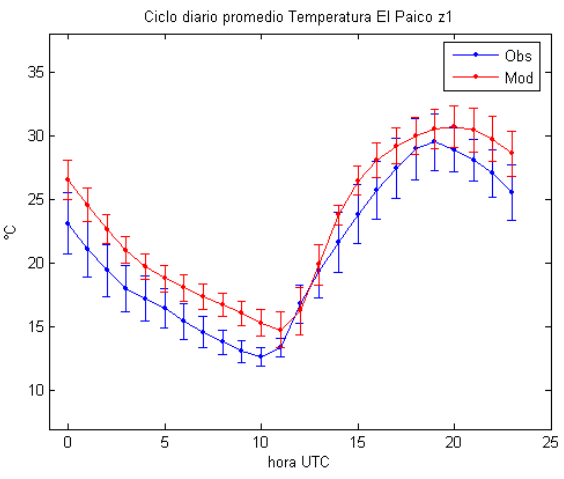
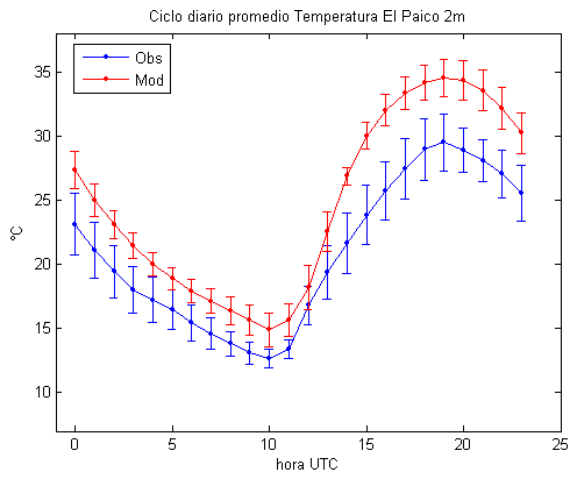
Estaciones urbanas (a la izquierda t2m y a la derecha tz1)



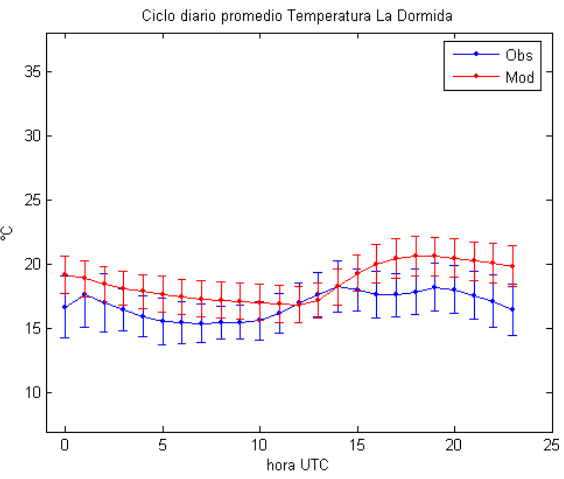
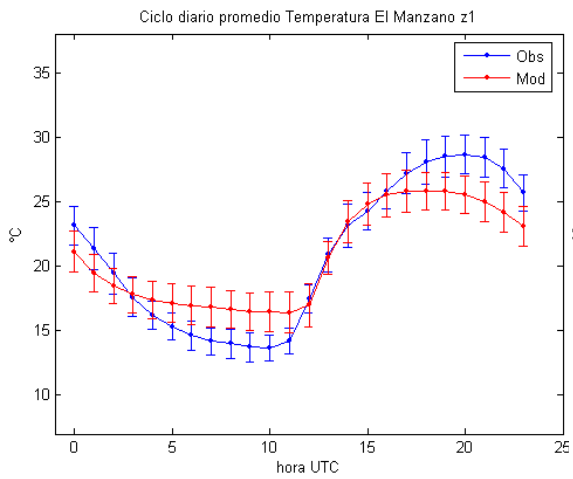


Estaciones de la zona rural (a la izquierda t2m y a la derecha tz1)



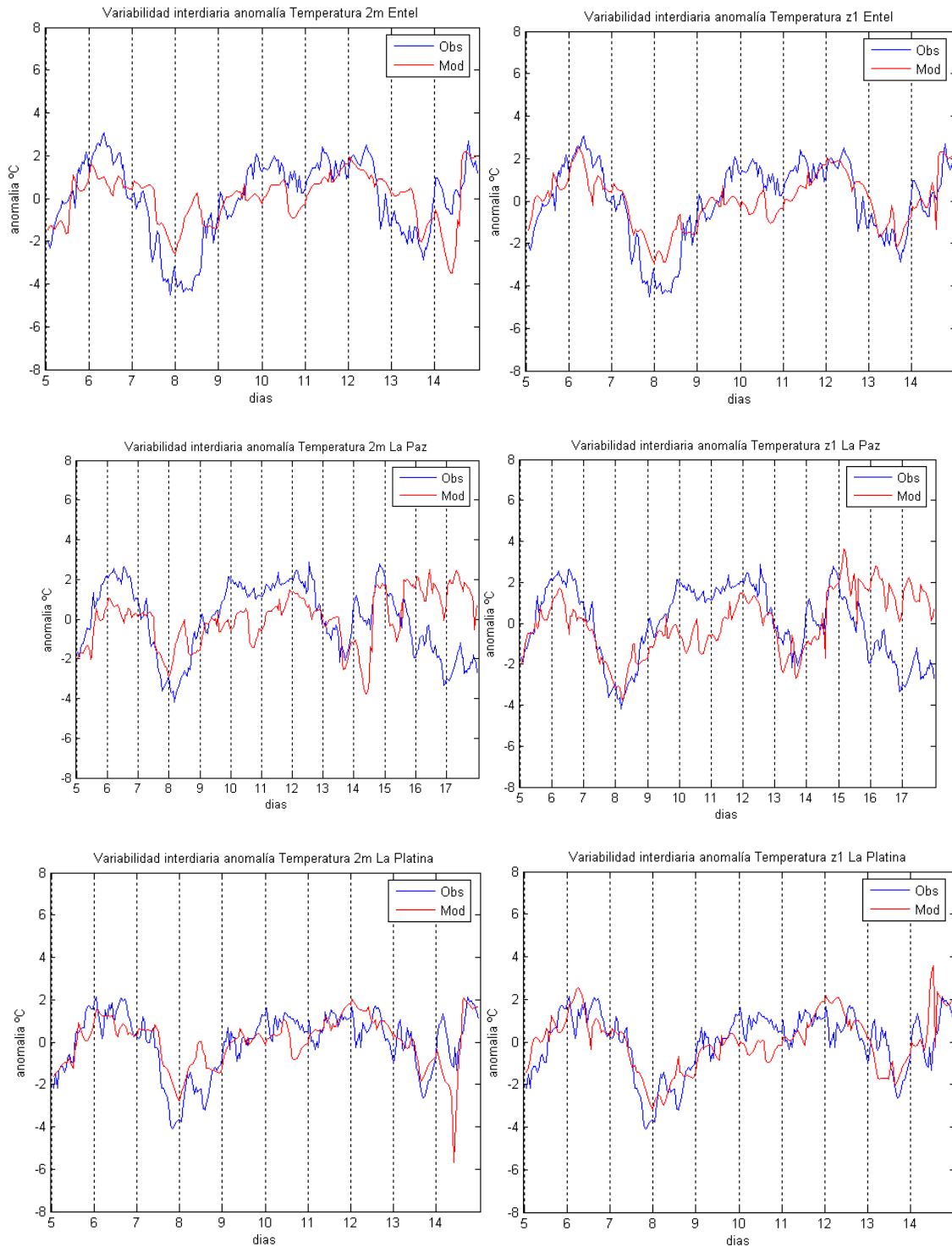


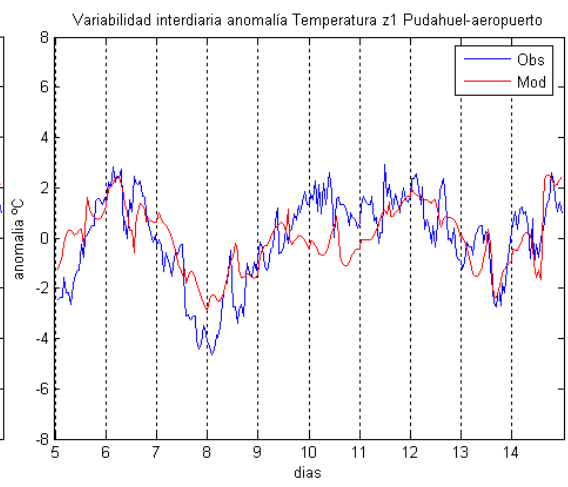
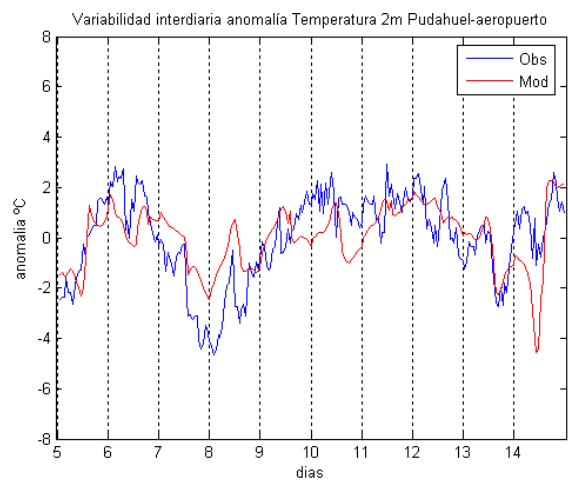
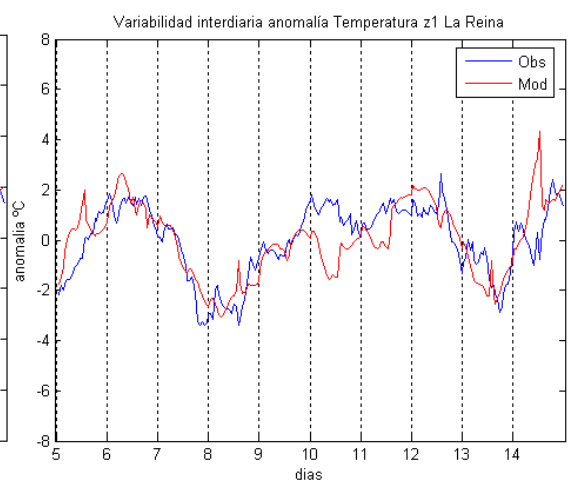
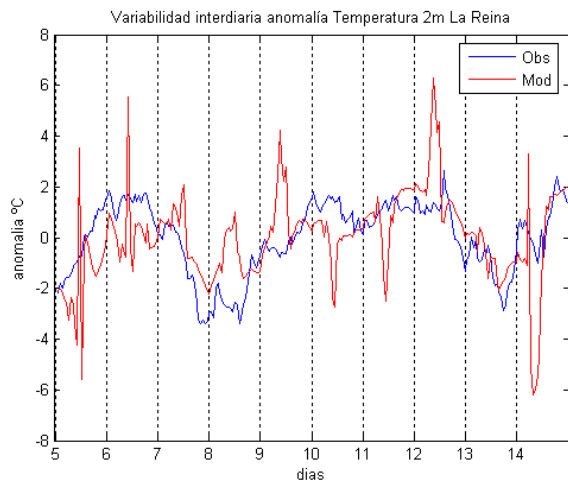
Estaciones de altura (ciclo diario de ambas obtenido de tz5, nivel vertical 5 del modelo)



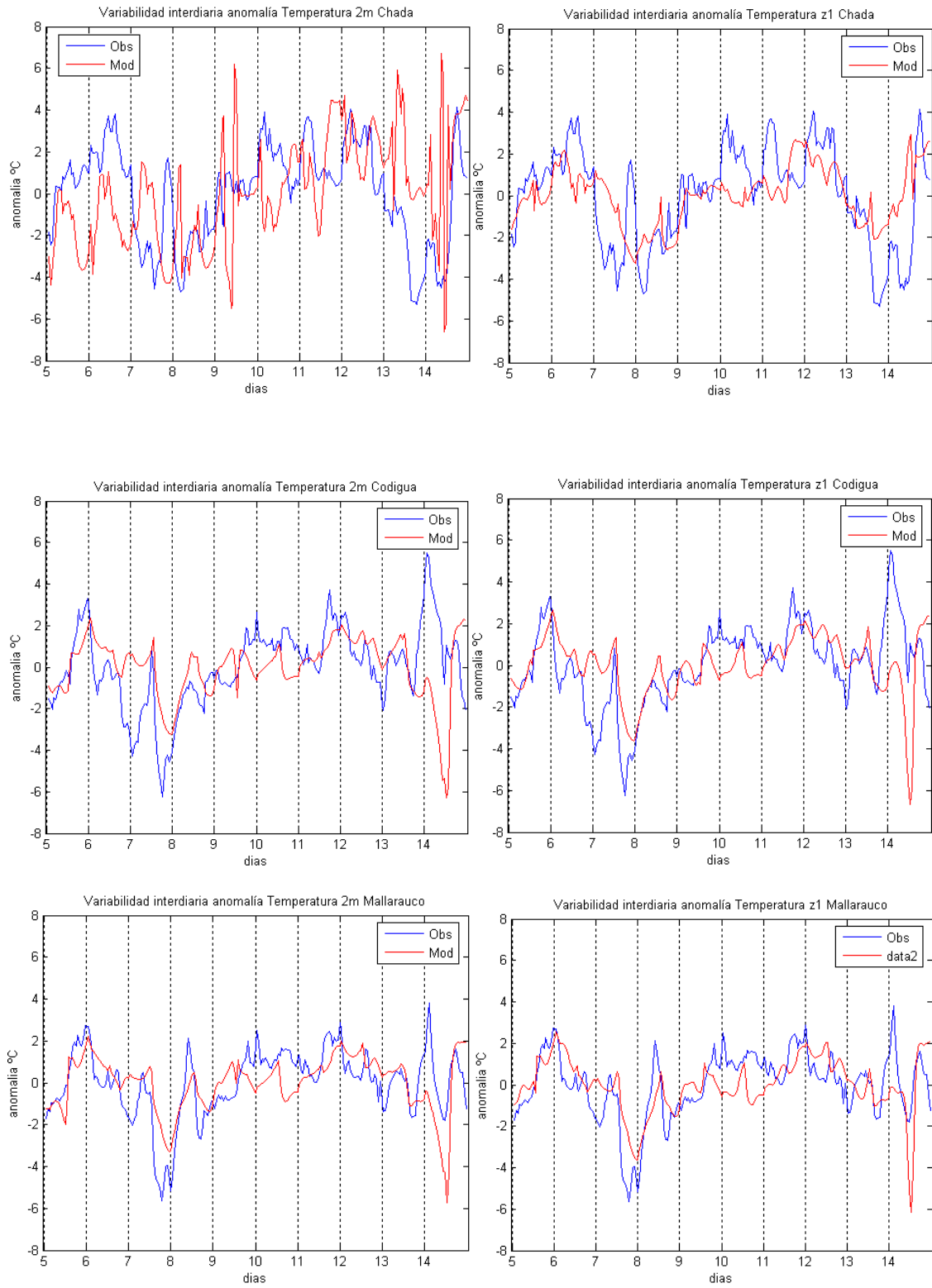
Anexo 4. Serie de anomalías observadas y modeladas de temperatura

Estaciones urbanas (a la izquierda t2m y a la derecha tz1)

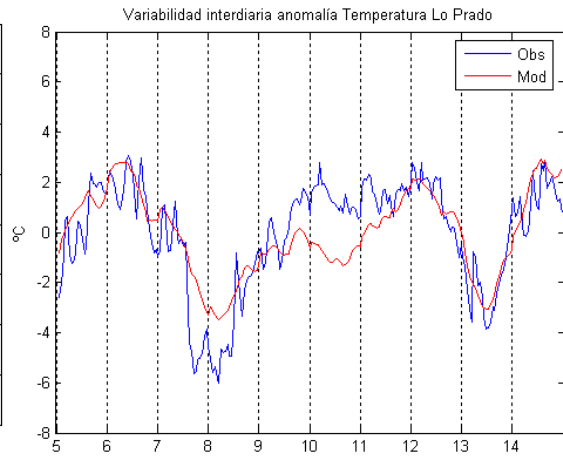
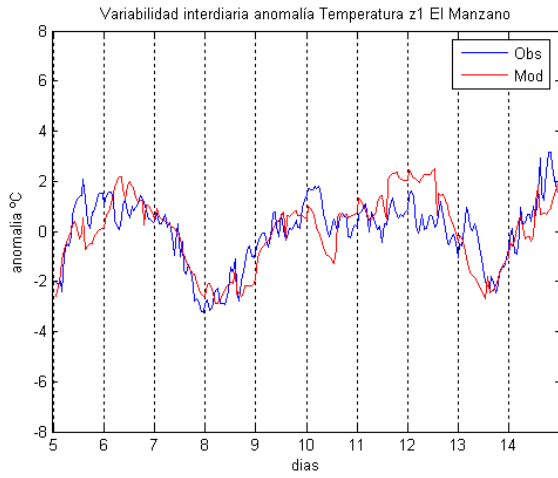




Estaciones de la zona rural (a la izquierda t2m y a la derecha tz1)

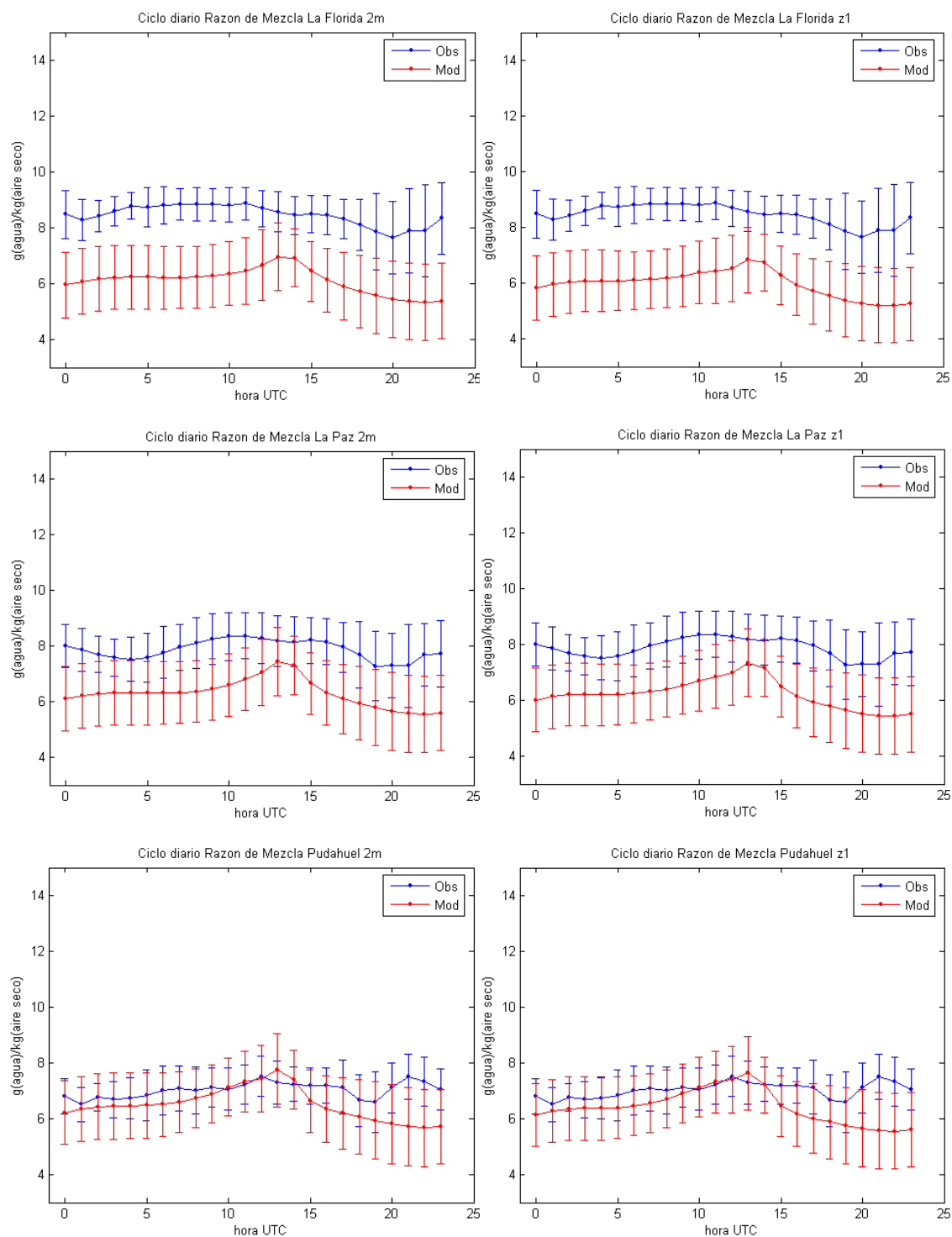


Estaciones de altura (ciclo diario de ambas obtenido de tz5, nivel vertical 5 del modelo)

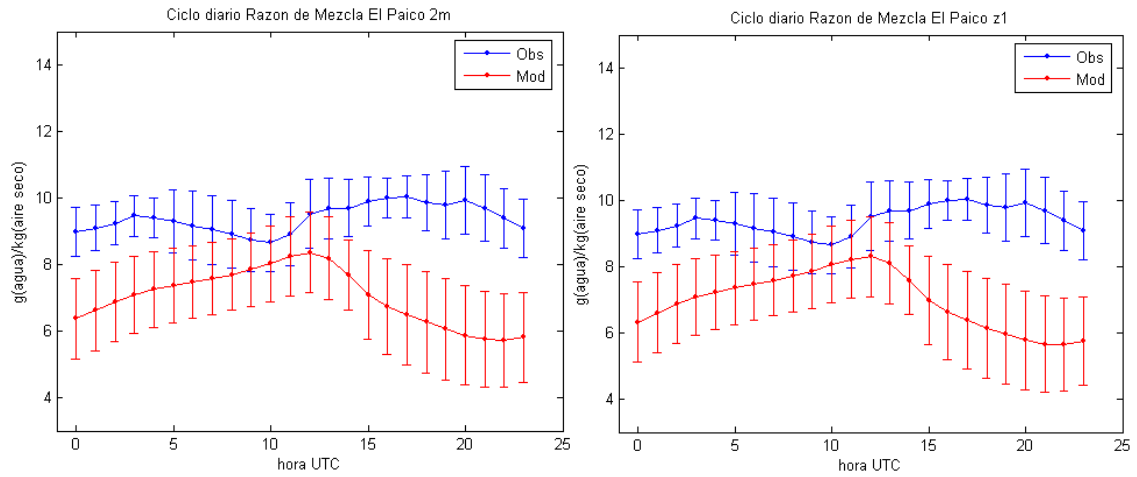


Anexo 5. Ciclos diario medios observados y modelados de razón de mezcla de vapor de agua

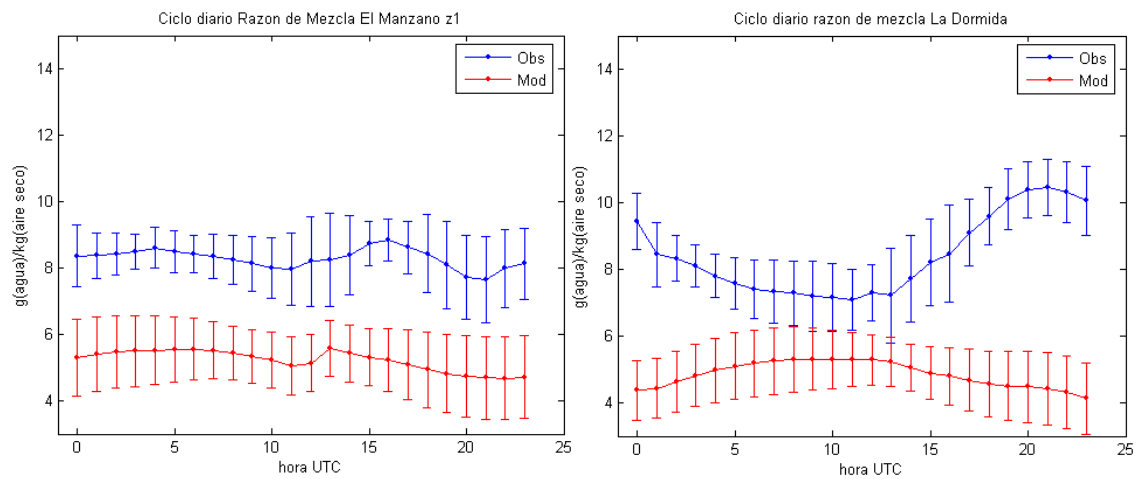
Estaciones urbanas (a la izquierda t2m y a la derecha tz1)



Estaciones del secano (a la izquierda t2m y a la derecha tz1)

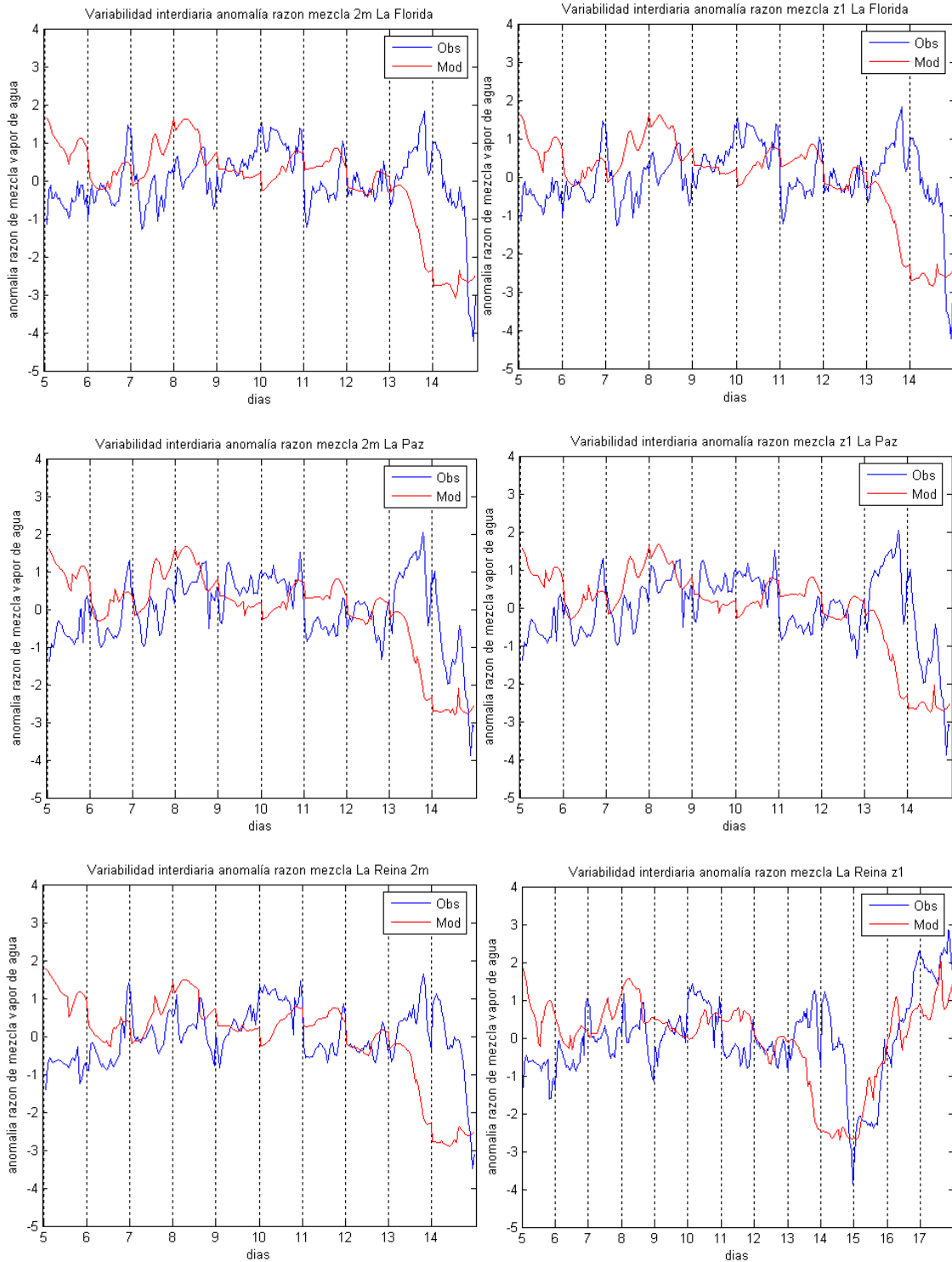


Estaciones de altura (ciclo diario de ambas obtenido de tz5, nivel vertical 5 del modelo)

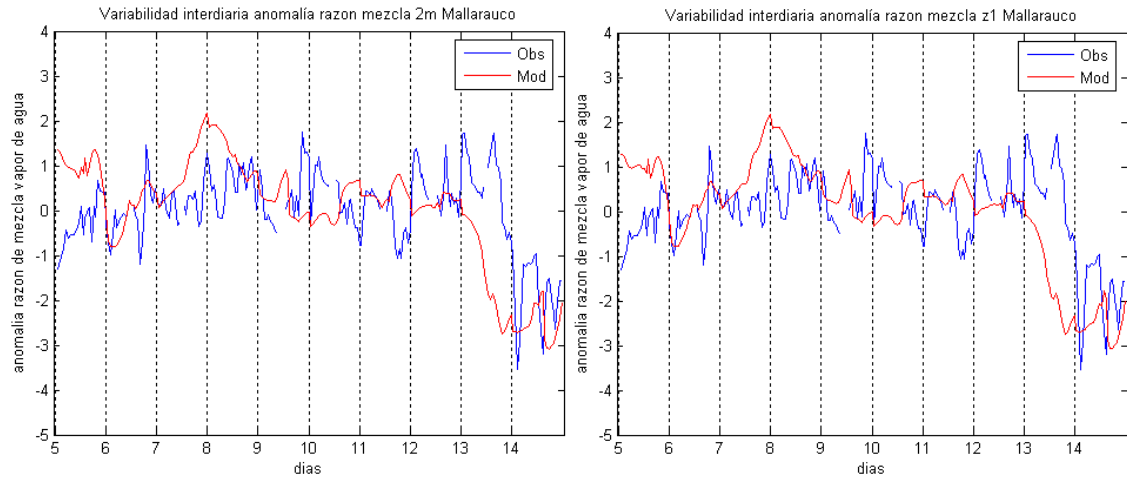


Anexo 6. Serie de tiempo de anomalías observadas y modeladas de razón de mezcla de vapor de agua

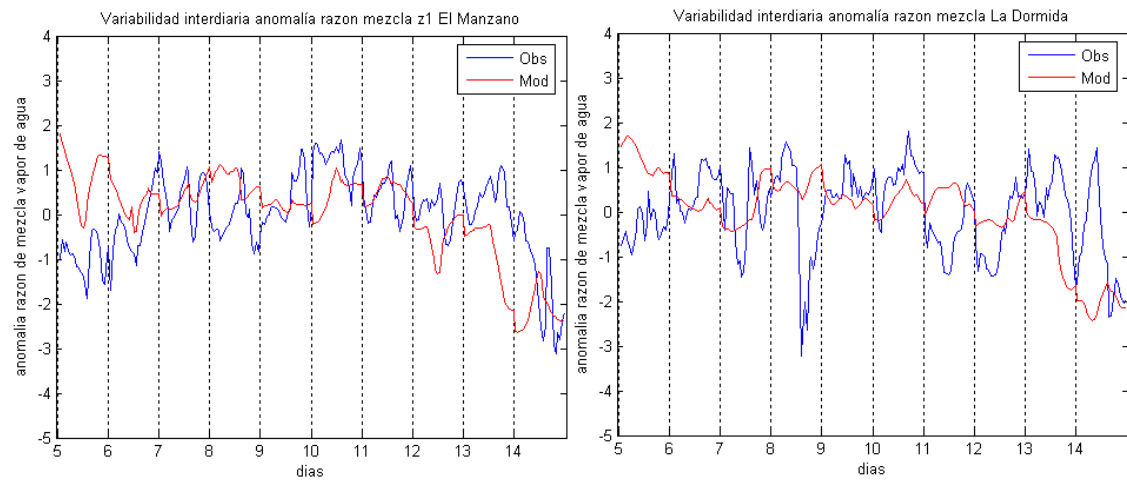
Estaciones urbanas (a la izquierda t2m y a la derecha tz1)



Estaciones del secano (a la izquierda t2m y a la derecha tz1)

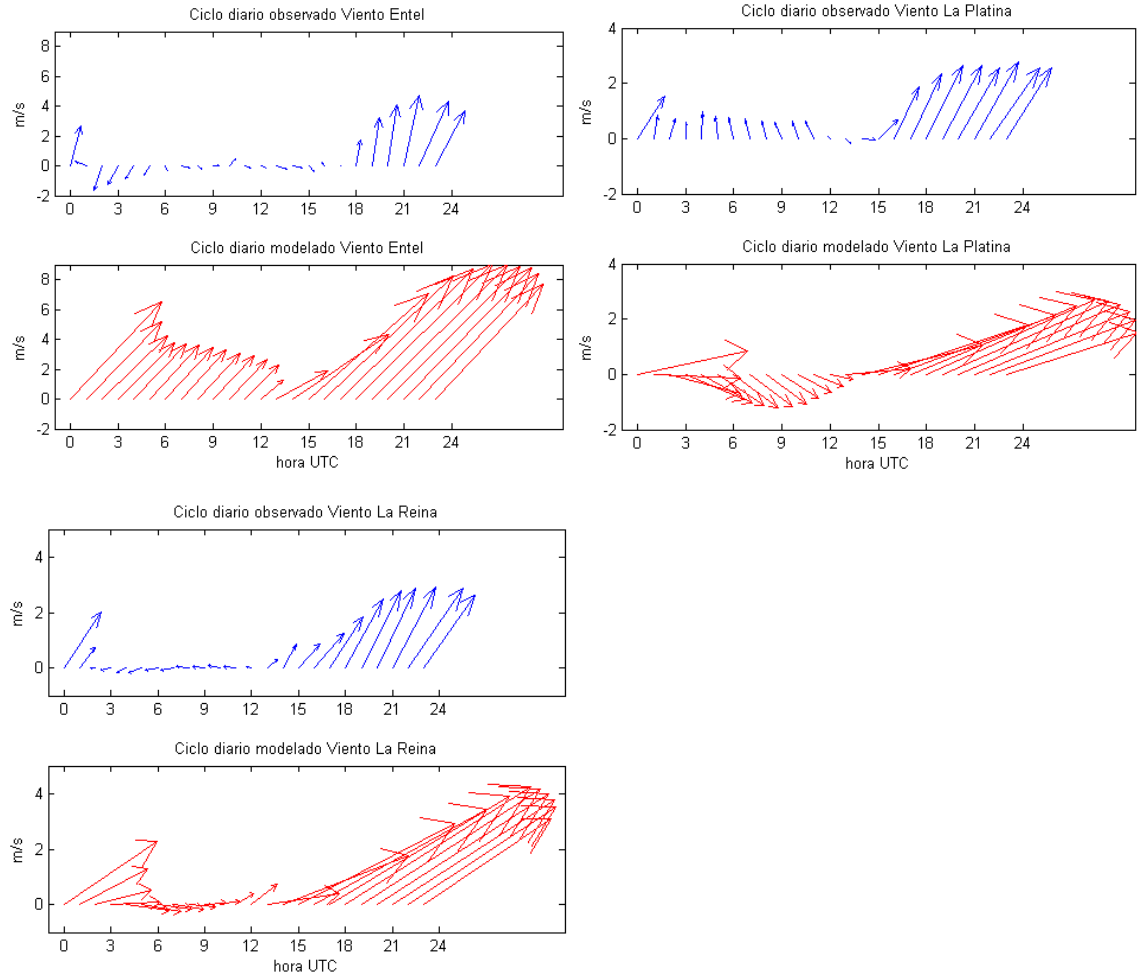


Estaciones de altura (ciclo diario de ambas obtenido de tz5, nivel vertical 5 del modelo)

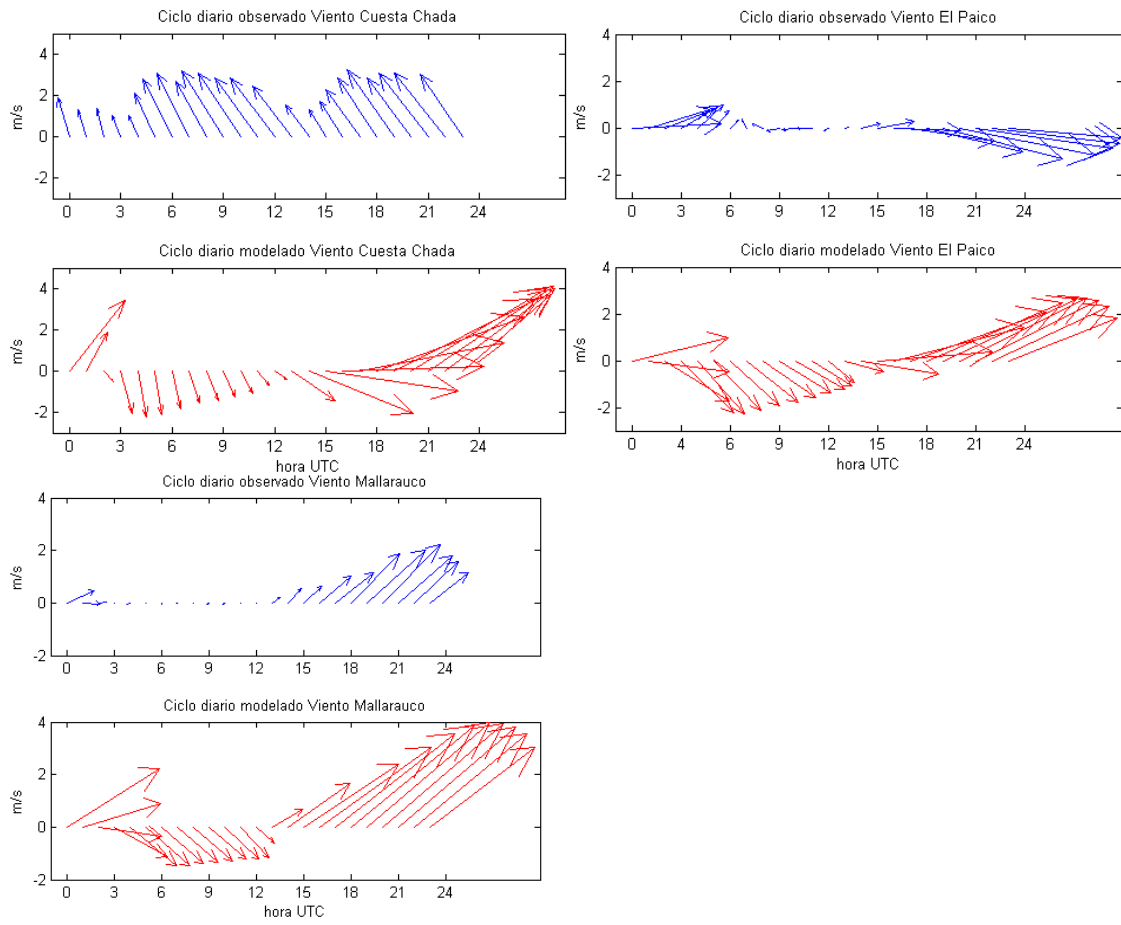


Anexo 7. Ciclos diarios de vector viento observado y modelado, datos desde z1

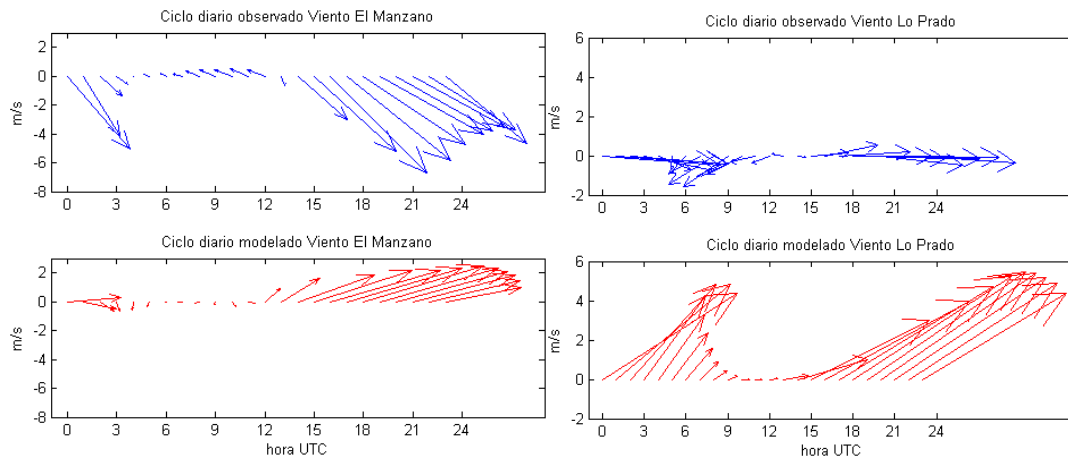
Estaciones urbanas



Estaciones del secano

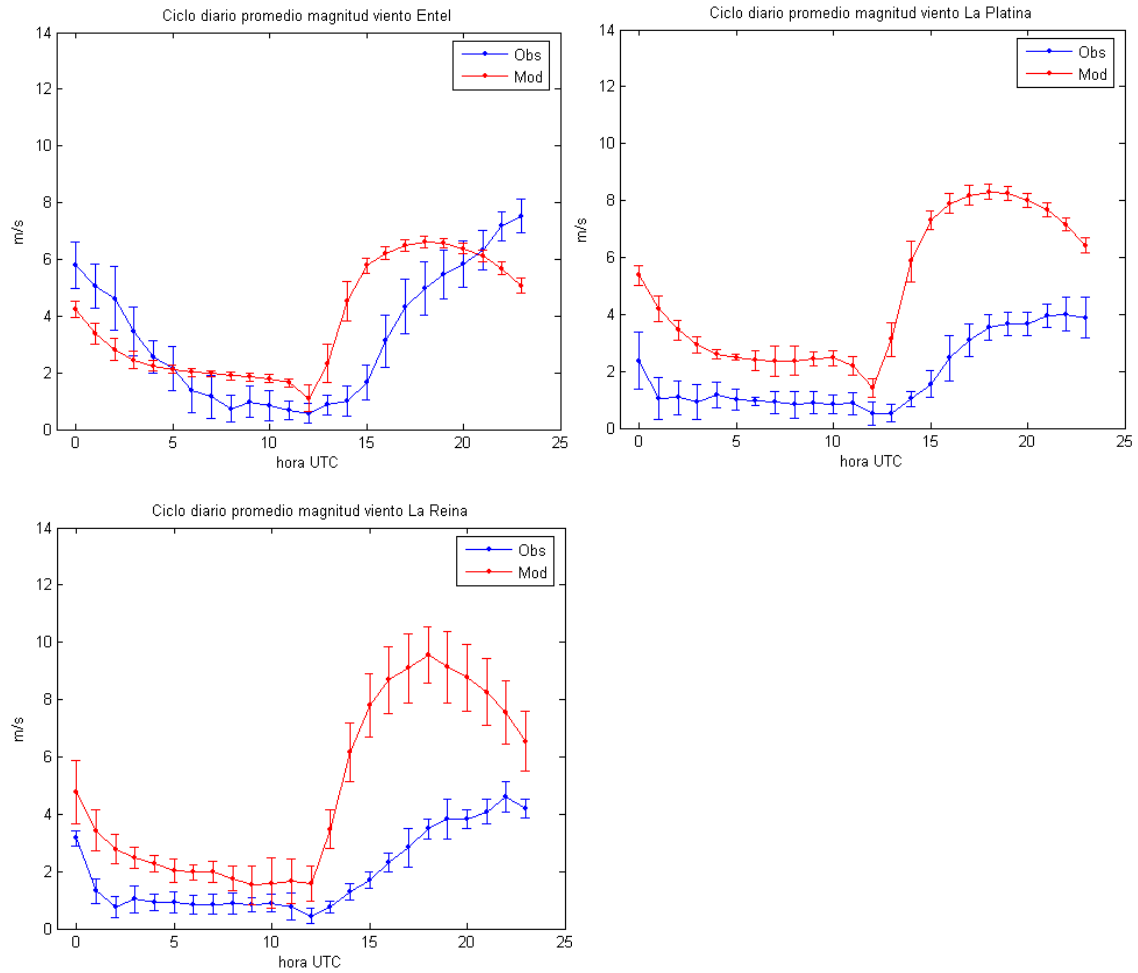


Estaciones de altura

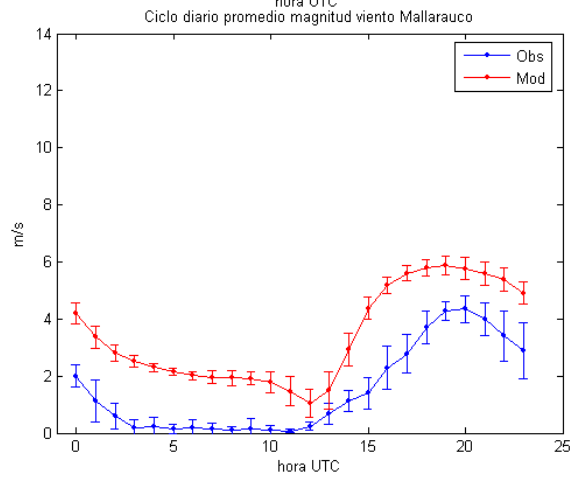
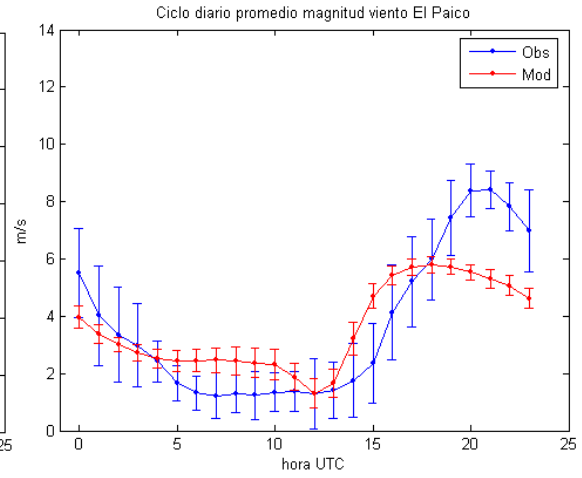
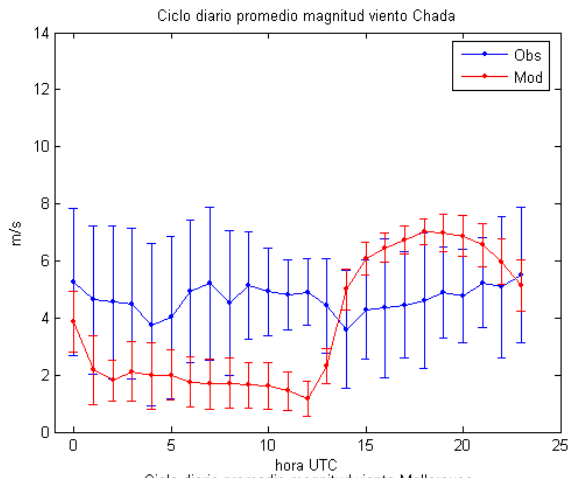


Anexo 8. Ciclos diarios de magnitud del viento observado y modelado, datos a 10m

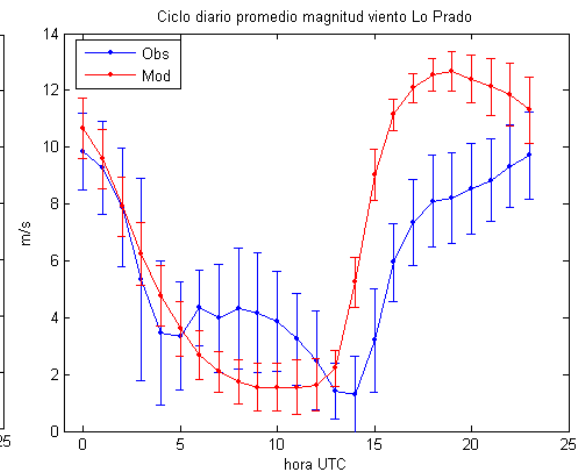
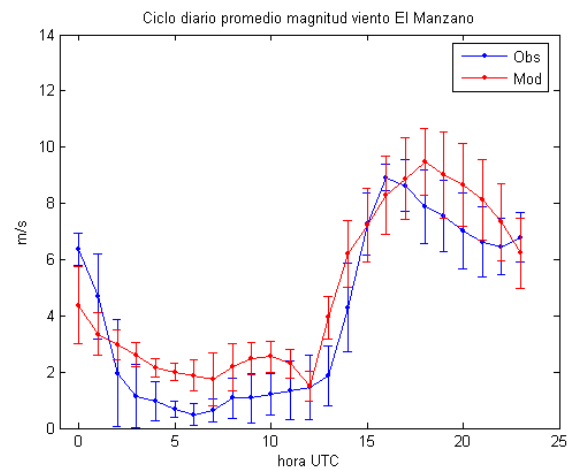
Estaciones urbanas



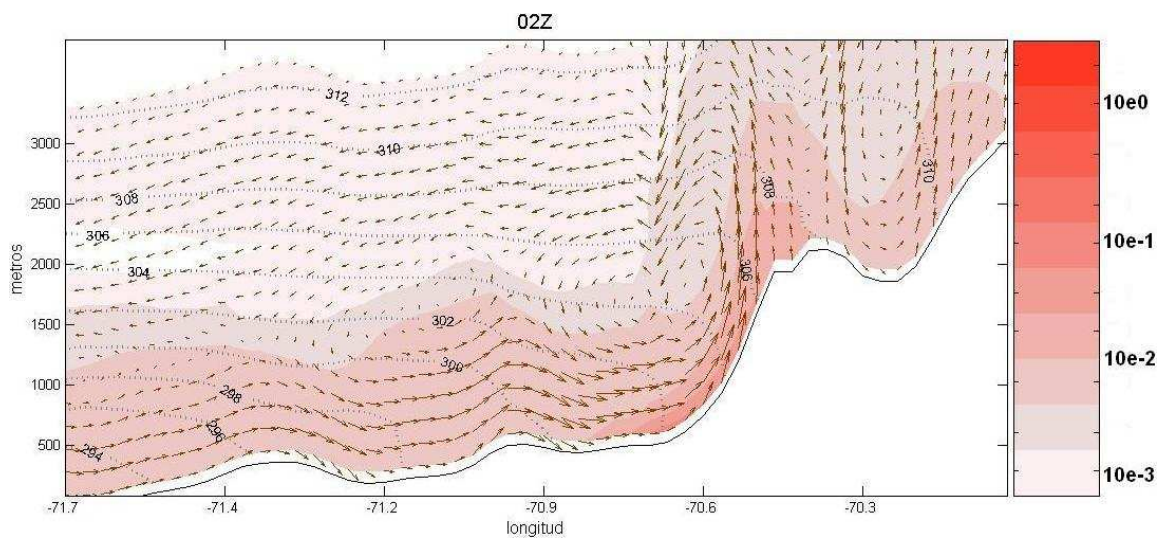
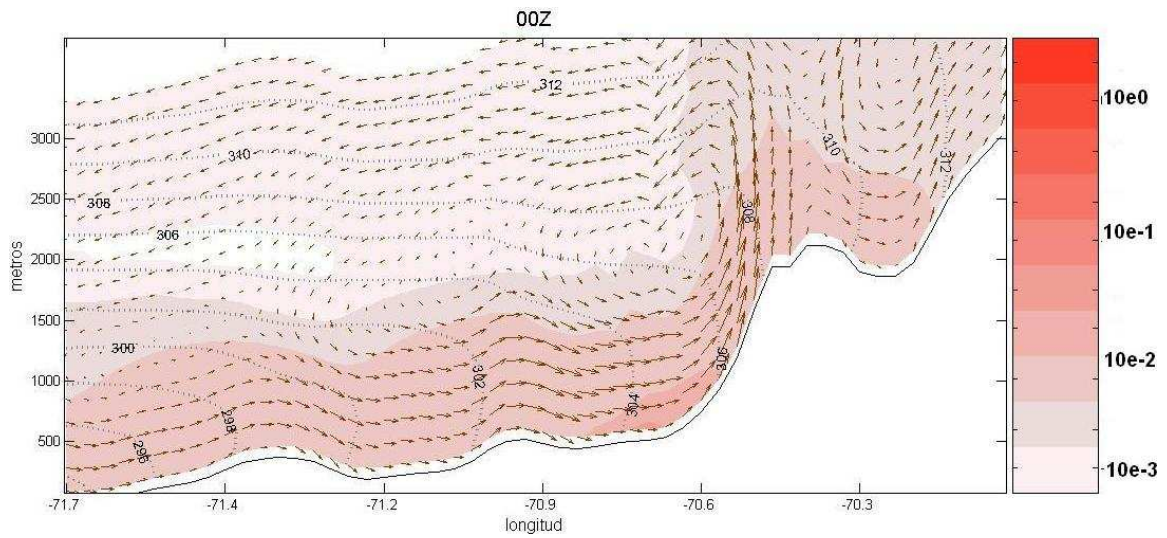
Estaciones del secano

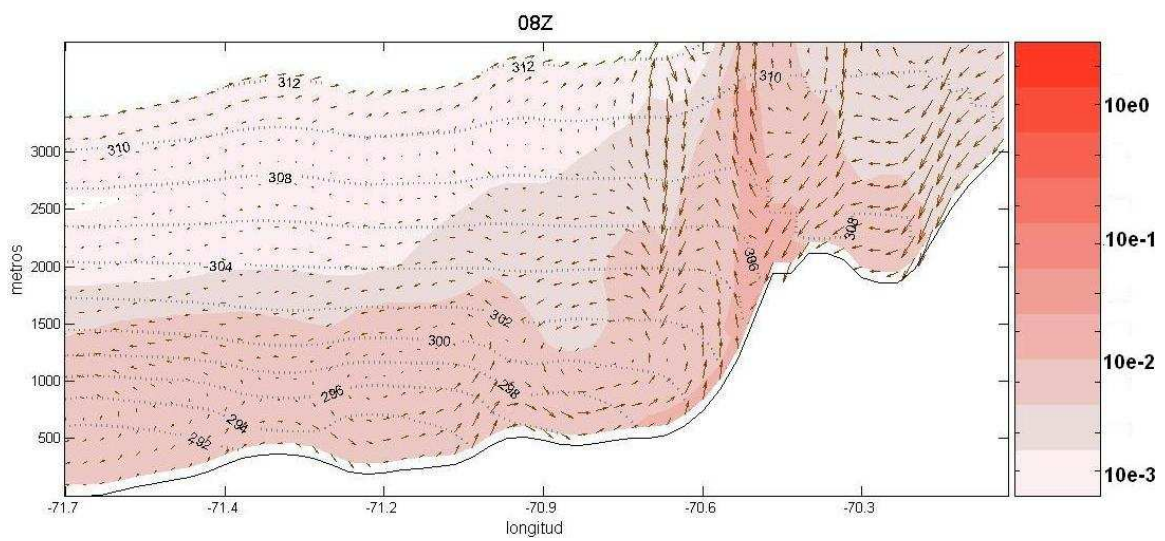
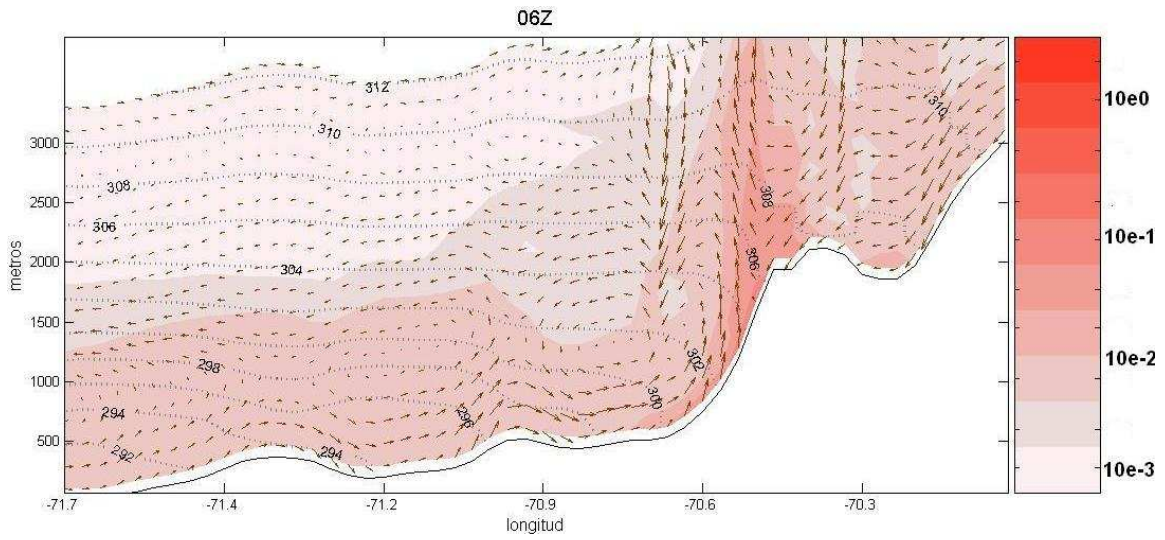
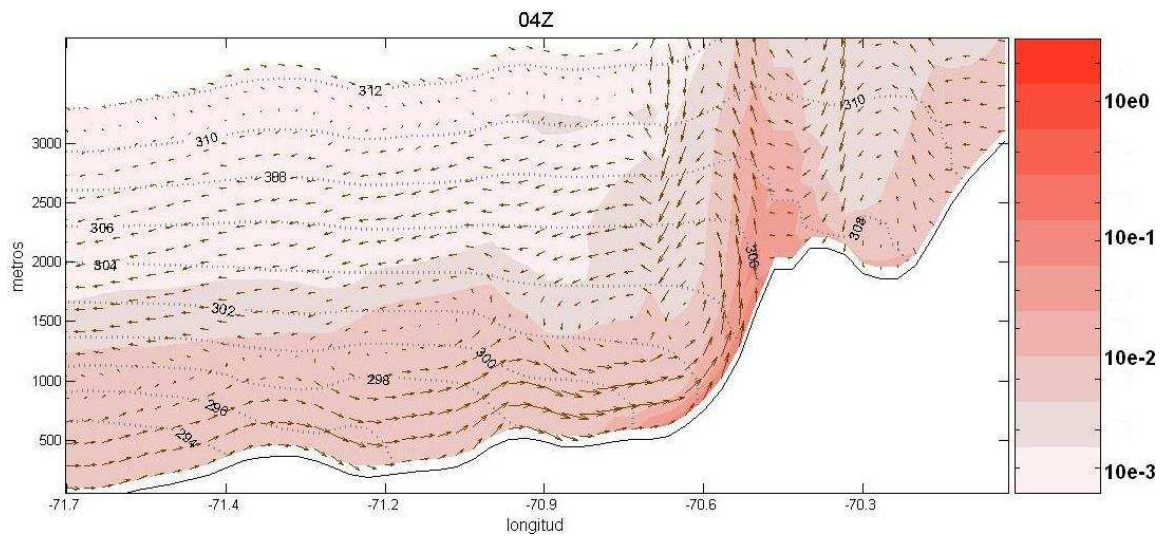


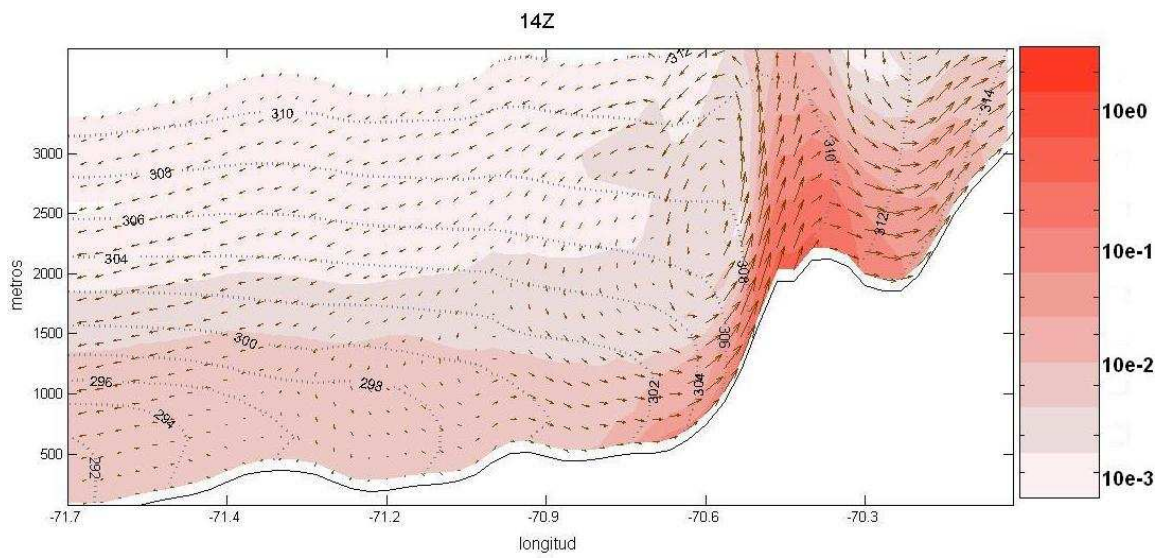
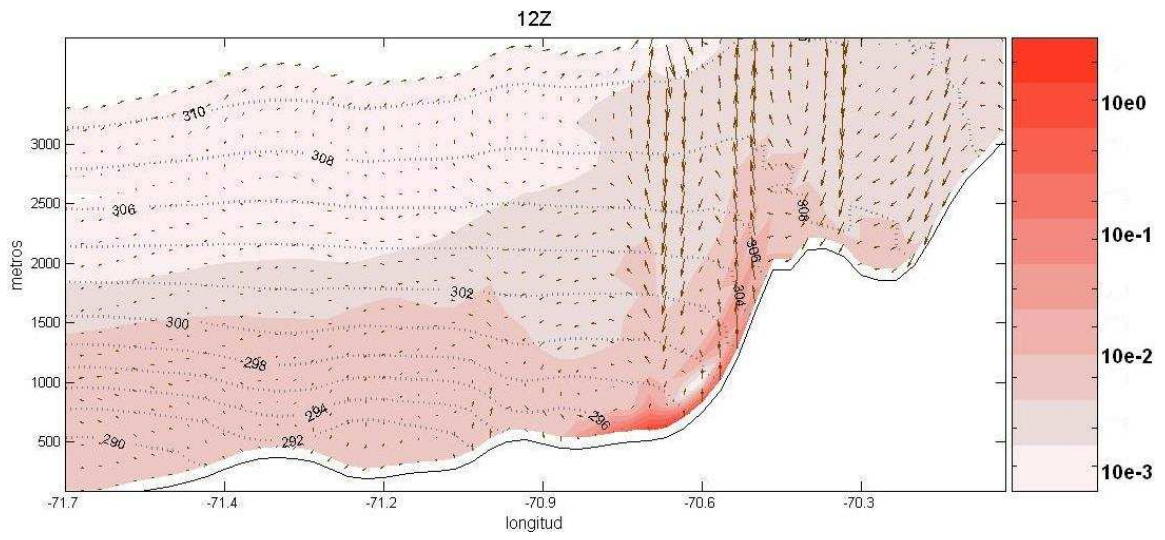
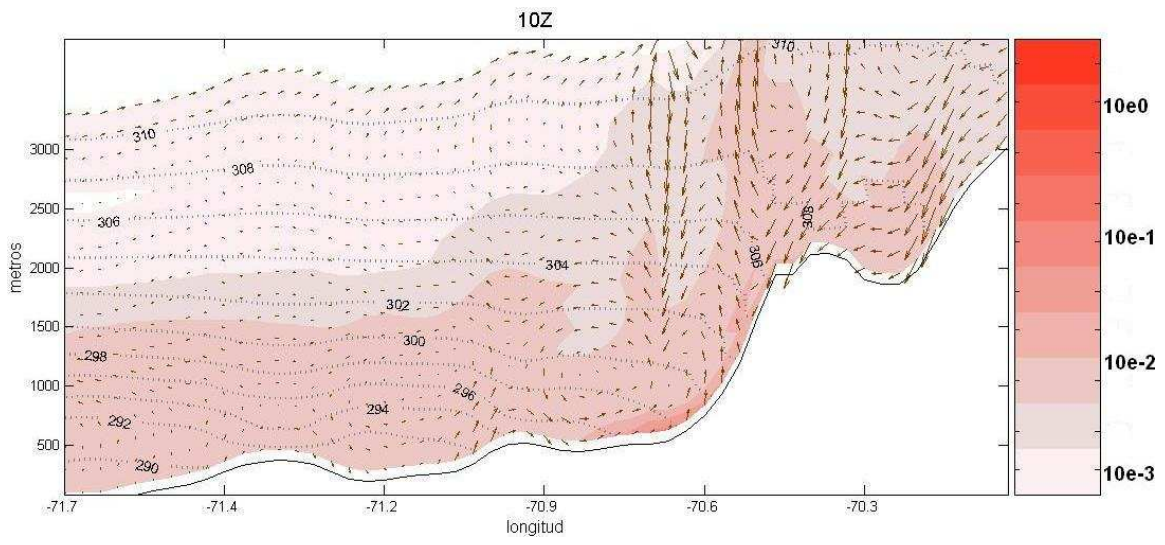
Estaciones de altura

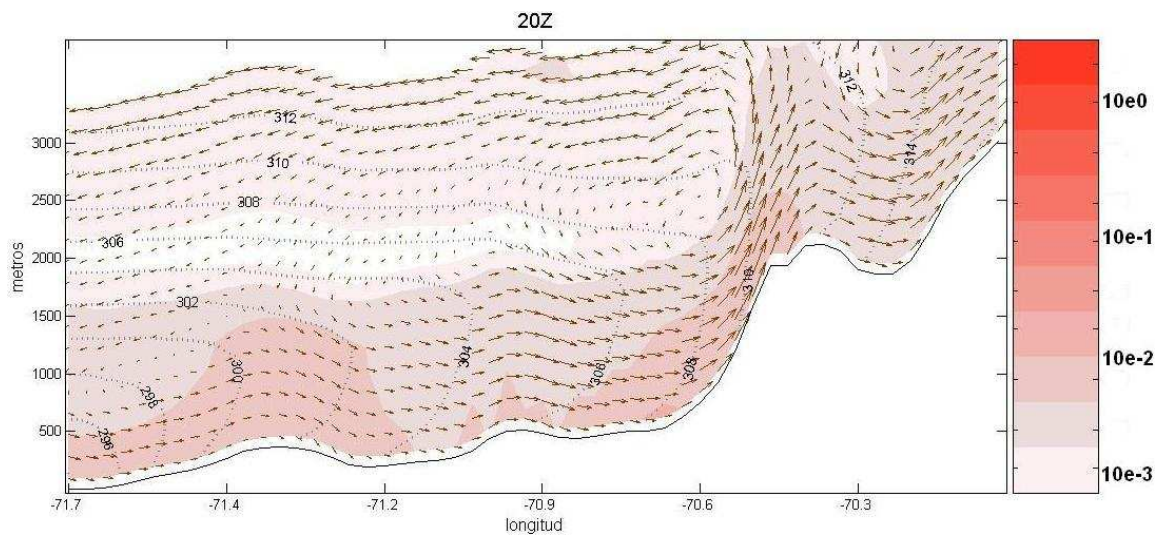
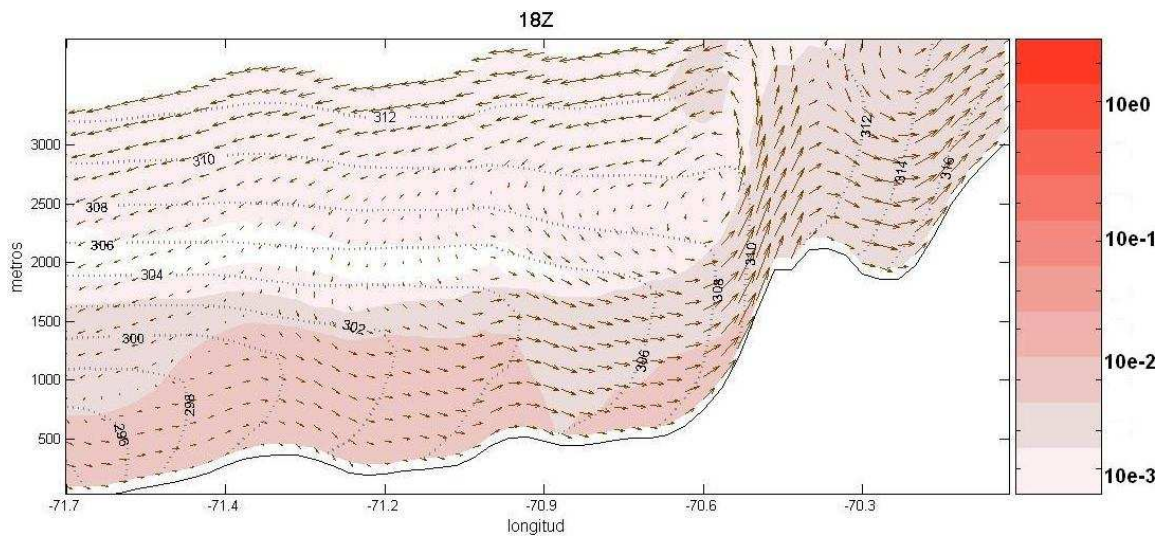
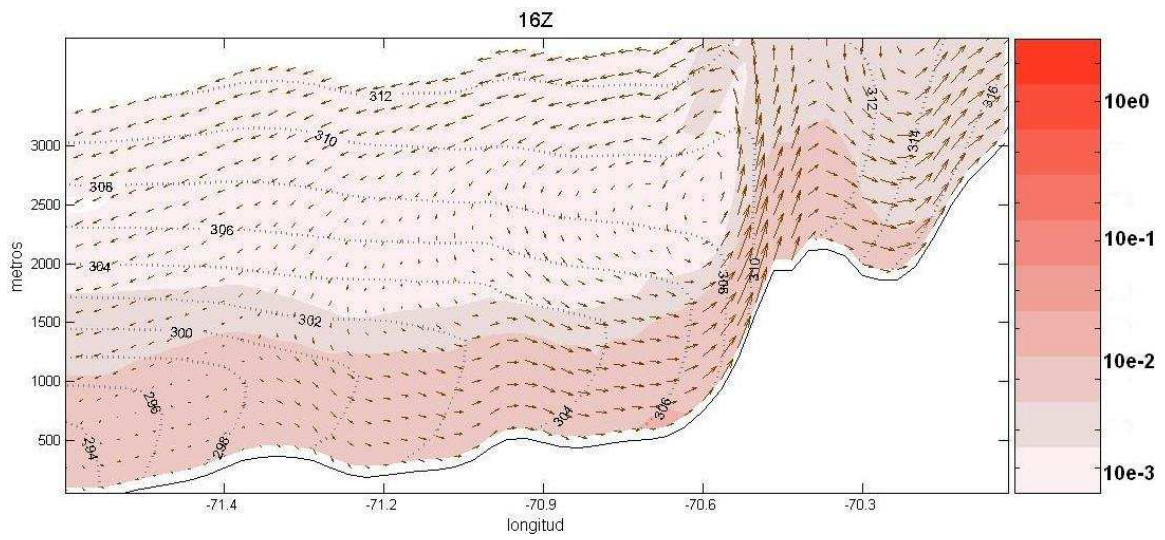


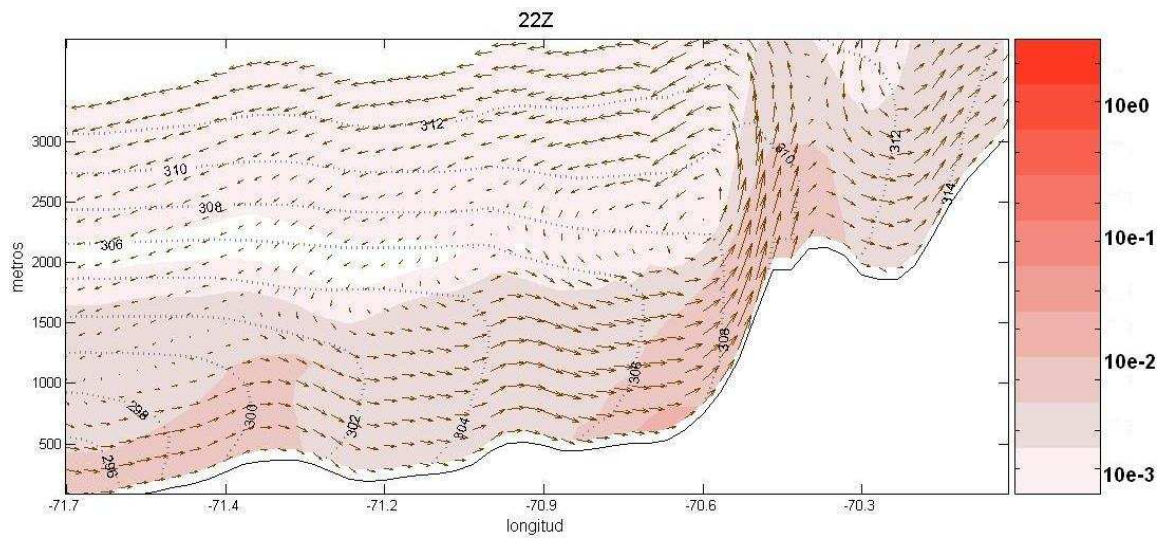
Anexo 9. Corte latitud-altura de razón de mezcla de CO, temperatura potencial y componente u y w (vectores).



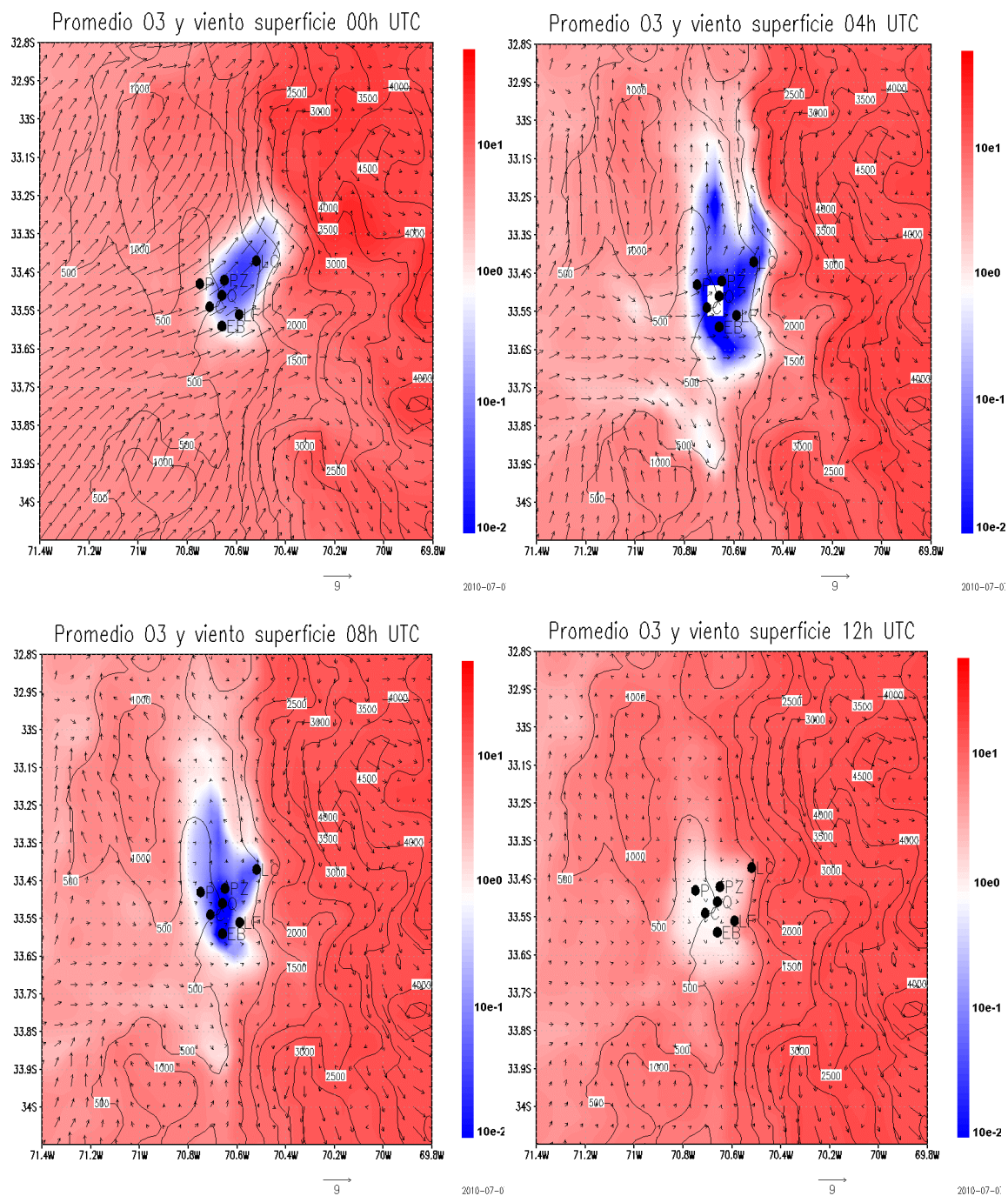




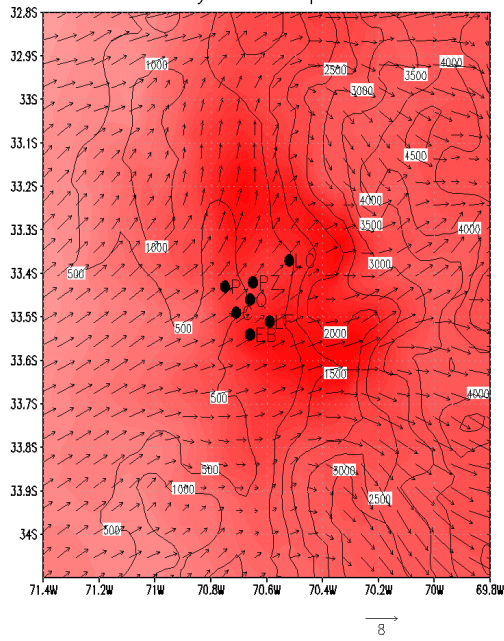




Anexo 10. Distribución espacial media de ozono, escala logarítmica

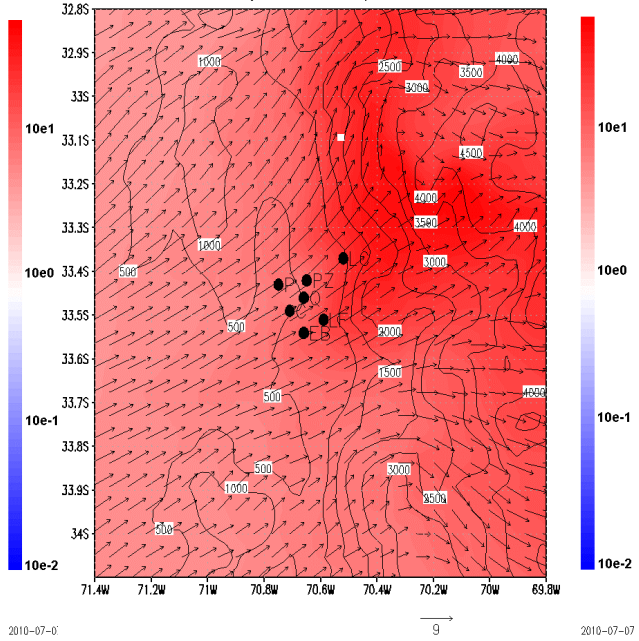


Promedio O3 y viento superficie 16h UTC



2010-07-07

Promedio O3 y viento superficie 20h UTC



2010-07-07