

# Análisis de Sensibilidad del Modelo Numérico WRF-Chem al Inventario de Emisiones Antropogénicas

## Sensitivity Analysis of the WRF-Chem Numerical Model to the Inventory of Anthropogenic Emissions

Presentación: 12/08/2024

Doctorando:

**Eduardo Gabriel LÓPEZ**

Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental (CIQA), Facultad Regional Córdoba (FRC) – Argentina.  
[elopez@ciqa.com.ar](mailto:elopez@ciqa.com.ar)

Director:

**Roberto Carlos PEPINO MINETTI**

Codirector:

**Salvador Enrique PULIAFITO**

### Resumen

La contaminación del aire ambiental incide directamente sobre la salud de la población y el medioambiente por lo que el Estado debe monitorear el recurso para minimizar su impacto. Sin embargo, los altos costos y dificultades asociadas a la instalación y mantenimiento de una red extendida y permanente de monitoreo de la calidad de aire en la Provincia de Córdoba, han promovido la implementación de modelos numéricos que permiten estimar las fuentes de emisión y la concentración final de diferentes compuestos químicos en un momento y lugar determinados. Dentro de los más difundidos, el modelo WRF-Chem es ampliamente utilizado debido a su ventaja de resolver de manera simultánea el factor meteorológico acoplado al factor químico pues cambios en la química pueden alimentar y modificar procesos de la meteorología local y viceversa. En el proceso de validar el modelo en la provincia, se analizó la sensibilidad del modelo al emplear un inventario local de emisiones antropogénicas frente al inventario global EDGAR-HTAP. Se observó que las concentraciones simuladas ajustan estadísticamente mejor ( $r > 0.3$ ) a los valores medidos por una estación de monitoreo in-situ si se utiliza el inventario local.

Palabras clave: Calidad del aire; Modelado de dispersión de contaminantes; WRF-Chem; Inventarios antropogénicos

### Abstract

Ambient air pollution directly affects the health of the population and the environment; therefore, the State must control the emission sources to minimize its impact. However, in the province of Córdoba the high costs and difficulties associated with the installation and maintenance of an extensive and permanent air quality monitoring network have promoted the implementation of numerical models that allow for the estimation of emission sources and the final concentration of different chemical compounds at a specific time and place. Among the most widely used models, the WRF-Chem model is extensively utilized due to its advantage of simultaneously resolving the meteorological factor coupled with the chemical factor, as changes in chemistry can influence and modify local meteorological processes and vice versa. In the process of validating the model in the province, the sensitivity of the model was analyzed by using a local inventory of anthropogenic

emissions compared to the global EDGAR-HTAP inventory. It was observed that the simulated concentrations statistically match better ( $r > 0.3$ ) with the values measured by an in-situ monitoring station when the local inventory is used.

Keywords: Air quality; Pollutant dispersion modeling; WRF-Chem; Anthropogenic inventories.

## Introducción

El cambio climático y la calidad del aire son problemas ambientales interrelacionados con graves consecuencias para la salud humana y los ecosistemas globales. Actualmente, más de la mitad de la población mundial (alrededor del 55%) vive en zonas urbanas y según estimaciones de la Organización Mundial de la Salud, la contaminación del aire es responsable de 7 millones de muertes prematuras por año en adultos asociados a enfermedades respiratorias, cardíacas y accidentes cerebrovasculares (WHO, 2021).

Frente a esta problemática, diversos países avanzaron en la evaluación de la calidad del aire y del cambio climático a través de la implementación de modelos de transporte químico (CTM) para ampliar la cobertura espacial de las estaciones de monitoreo continuo ya establecidas. Los CTM surgieron como herramientas informáticas importantes para comprender el impacto de las emisiones de contaminantes en la composición química de la atmósfera y las consecuencias sobre el medio ambiente, y para diseñar estrategias eficientes de reducción de los efectos de la contaminación del aire.

Dentro de estas herramientas numéricas, se destaca al modelo químico WRF-Chem, el cual es ampliamente utilizado para simulaciones regionales de calidad del aire en todo el mundo y validado con observaciones en tierra (Gao et. al, 2014; Kumar et. al, 2012). La bibliografía sugiere que el WRF-Chem proporciona patrones espacio-temporales confiables para la mayoría de las variables meteorológicas y químicas, lo que añade confianza a su aplicabilidad en el contexto de la evaluación del riesgo de contaminación del aire para la salud humana y los ecosistemas (Sicard et. al, 2021).

## Materiales y Métodos

La provincia de Córdoba se ubica en la región centro de Argentina y cuenta con 3.978.984 habitantes, lo que la convierte en la segunda provincia más poblada del país (INDEC, 2016). El crecimiento de la industrialización en los principales centros urbanos de la provincia en conjunto con la publicación de la Resolución Provincial N° 105 de Estándares de Aire promovieron la necesidad del monitoreo del aire. Actualmente la provincia cuenta con una única estación de monitoreo de calidad del aire (AQMS) que emplea equipos de referencia (Pepino Minetti et. al, 2020) homologados por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (US-EPA). La AQMS pertenece al centro de investigación CIQA de la FRC-UTN y se encuentra instalada en el microcentro de la ciudad de Córdoba frente a una arteria de alto tránsito. La estación registra concentraciones de óxidos de nitrógeno (NO y NO<sub>2</sub>), monóxido de carbono (CO), ozono (O<sub>3</sub>) y material particulado de diámetro equivalente menor a 2.5 micras (PM<sub>2.5</sub>) empleando métodos de referencia de US-EPA en todos los casos. Para el presente estudio, se validaron las salidas del modelo WRF-Chem con datos de calidad de aire recabados en superficie por la AQSM de CIQA.

### A. Parametrización y detalles de la simulación en el modelo WRF-Chem

El WRF-Chem (Weather Research and Forecasting with Chemistry) es un modelo numérico utilizado para estudiar la interacción entre la química atmosférica y la meteorología. Combina el modelo de pronóstico meteorológico WRF con una serie de módulos químicos para simular procesos físicos y químicos en la atmósfera (Kumar et. al, 2012). El modelo es completamente adaptable a distintos escenarios y regiones de interés gracias a que permite optar entre múltiples esquemas químicos, físicos y dinámicos, de manera tal de hallar la configuración que mejor se ajuste a los datos observados por las estaciones de monitoreo. En la Tabla 1, se resume la configuración elegida para la simulación ejecutada en el presente estudio siguiendo parametrizaciones previamente evaluadas en bibliografía (Tuccella et. al, 2012). El modelado se llevó a cabo para el periodo entre el 19 y 26 de abril del 2022 en un dominio centrado en Córdoba. Se consideraron 24 h de spin-up

(correspondiente al 19-04) siendo este el tiempo de simulación necesario para garantizar que el modelo regional alcance un equilibrio de manera tal que genere su propia variabilidad interna minimizando su dependencia a las condiciones iniciales.

### B. Comparación entre el inventario local y el global

Para caracterizar el aporte de las emisiones antropogénicas en una simulación, el modelo químico WRF-Chem puede hacer uso de diversos inventarios de emisiones, tanto globales como regionales. El inventario global EDGAR-HTAP provisto por la Comisión Europea, proporciona datos sobre las emisiones antropogénicas a una resolución global de 0.1 x 0.1 grados (aproximadamente 11 x 11 km). Se basa en una variedad de fuentes de datos, incluyendo estadísticas energéticas, censos industriales, informes nacionales presentados en entes internacionales y modelos de emisiones regionales ajustado por inventarios científicos regionales y el uso de información satelital disponible. Aunque este inventario global ofrece una buena cobertura, su baja resolución ha conducido a desviaciones en las concentraciones obtenidas por el modelo (Puliafito et al, 2021). Para mejorar la precisión de las concentraciones simuladas por WRF-Chem, resulta crucial recurrir a inventarios regionales. En este sentido, investigadores de la UTN-Fac. Reg. Mendoza, pertenecientes al Grupo de Estudios Ambientales y Atmosféricos (GEAA), desarrollaron un inventario regional de emisiones antropogénicas con información específica para la región de Argentina, denominado EDGAR-GEAA. Este inventario abarca diversas fuentes locales que fueron agrupados de manera que coincidan con los sectores contemplados en el inventario global (EDGAR-HTAP). El inventario local cuenta con una resolución más detallada de  $2,5 \times 2,5$  km, con una distribución mensual. Para la elaboración del EDGAR-GEAA, los desarrolladores tuvieron en cuenta la información proporcionada por nación, diferenciando estadísticamente entre la población y las viviendas censadas. Se incorporaron datos de consumo de energía, ubicación de estaciones de servicio, ventas y consumo de combustibles, usuarios de gas natural, etc. (Puliafito et al, 2021). Para el presente estudio, se llevaron a cabo dos simulaciones distintas, una con el inventario de emisiones globales (EDGAR-HTAP) como dato de entrada, y la otra partiendo del inventario regional (EDGAR-GEAA). De esta forma, se posibilitó la comparación entre las simulaciones permitiendo evaluar la sensibilidad del modelo frente a los inventarios regionales.

Parametrización	Recursos o esquemas
Condiciones de contorno meteorológicas	Global Forecasting System (GFS)
Condiciones de contorno químicas	WACCM
Resolución	6 km horizontal x 50 niveles verticales hasta 50 hPa
Período de simulación	20 al 26 de abril de 2022 (spin-up: 19 de abril)
Microfísica	Esquema de Lie
Radiación onda larga	Rapid Radiative Transfer Model (RRTM)
Radiación onda corta.	Goddard Radiation Scheme
Capa superficial	Revised MM5 Monin-Obukhov scheme
Superficie del suelo	Unified Noah land-surface model
Capa límite	Yonsei University scheme (YSU)
Mecanismo químico fase gaseosa	RADM2
Fotólisis	Fast-J photolysis
Esquema químico	MOZART Chemistry and GOCART aerosols (MOZCART) using KPP library
Esquema de emisiones biogénicas	MEGAN 2.0 online
Esquema de quema de biomasa	Fire INventory from NCAR (FINN) 1 km x 1 km
Modelo de aerosoles	GOCART dust emissions

Tabla 1: Configuración del modelo siguiendo las parametrizaciones establecidas por Tuccella et. al (2012). Para obtener una descripción completa de las opciones, consúltese la guía del usuario del modelo (WRF-Chem Version 4.4. User's Guide, 2022).

### C. Indicadores para el análisis de sensibilidad

Para evaluar la sensibilidad del modelo frente a los inventarios antropogénicos, se compararon estadísticamente las concentraciones simuladas contra los datos observados en campo. Algunas de las métricas utilizadas corresponden al error absoluto medio (MAE) y al normalizado (NMAE) las cuales permiten dimensionar la medida de los errores absolutos entre las predicciones del modelo y los valores observados. A su vez, la raíz del error medio cuadrático (RMSE) ofrece una estimación de la dispersión de los errores y es útil para evaluar la precisión del modelo. Al ser cuadrático, penaliza con mayor peso las diferencias más grandes frente al MAE que es un índice lineal. El sesgo (BIAS) permite calcular la diferencia promedio entre las predicciones del modelo y los valores observados. Un sesgo positivo indica que el modelo

tiende a sobreestimar los datos simulados. Estas métricas se utilizaron con éxito en varios estudios para evaluar el rendimiento de los modelos regionales de calidad del aire (Grell et. al, 2005; Gupta y Mohan, 2015) y, en el presente caso, permitieron evaluar la sensibilidad del modelo frente al uso de un inventario antropogénico local o global.

## Resultados

Se compararon las salidas del modelo WRF-Chem utilizando un inventario local y un inventario global, contra las concentraciones registradas en superficie por la AQMS. Se tomó un tiempo de ponderación de 8 h debido a que algunos compuestos (CO, por ejemplo) tienen sus niveles guía o sus estándares internacionales, expresados en este intervalo de tiempo.

La evaluación de la sensibilidad del modelo se ilustra en la Figura 1. A nivel general, se observó que el modelo tiende a subestimar las concentraciones registradas en superficie. Esta diferencia es de esperar debido a que el tamaño de cuadrícula que se utilizó en el modelo (6 km) es mayor al radio de influencia de la AQMS. Como se mencionó anteriormente, la estación se encuentra situada en una arteria principal de la ciudad de Córdoba, por lo que sus mediciones caracterizan el comportamiento comercial del centro urbano y acompañan el perfil de flujo vehicular. La diferencia entre las resoluciones podría explicar la discrepancia entre los valores observados y simulados.

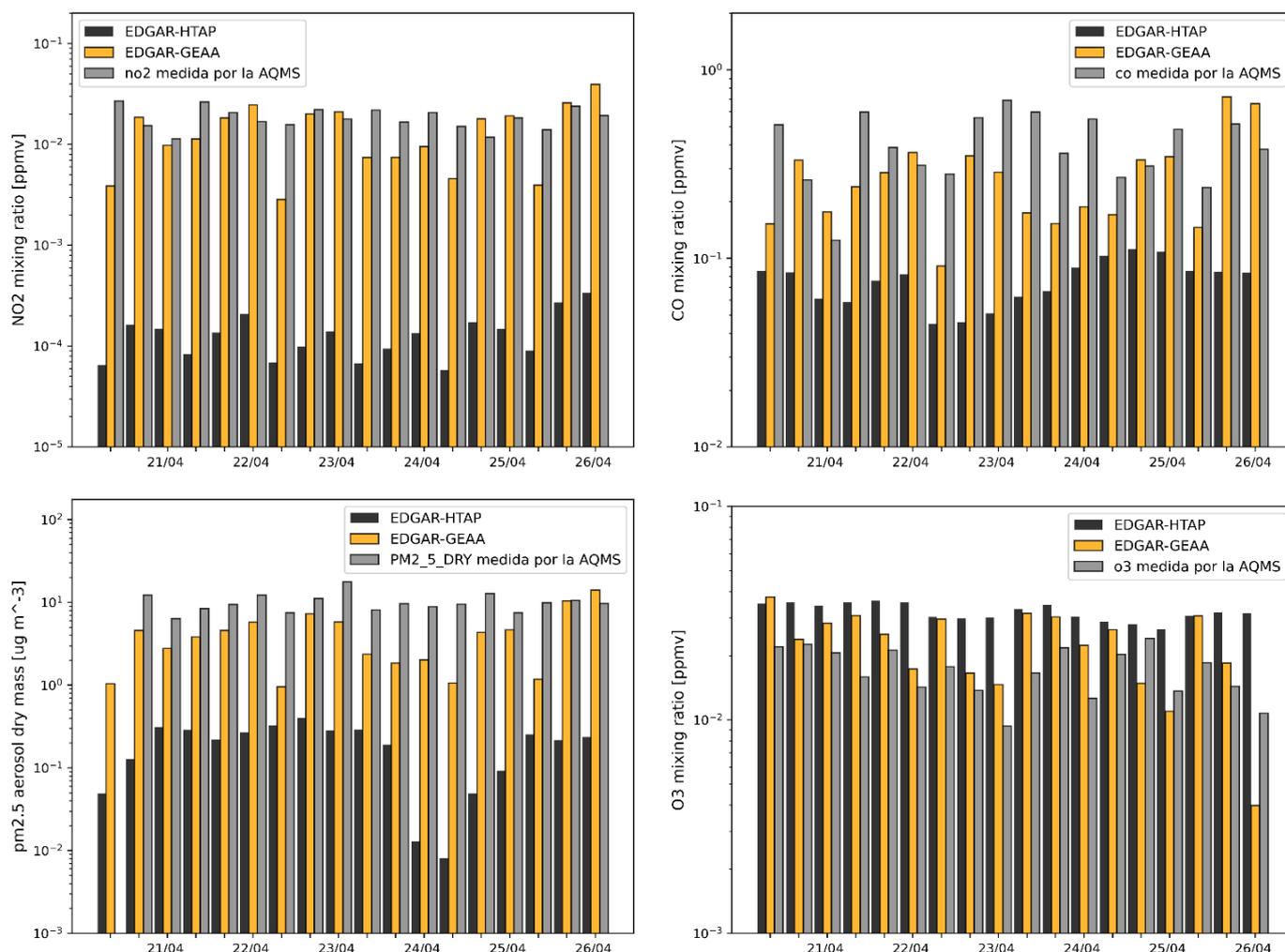


Figura 1: Concentraciones simuladas de NO<sub>2</sub>, CO, O<sub>3</sub> y PM<sub>2.5</sub> promediadas cada 8 h aplicando el inventario global EDGAR-HTAP y el inventario local EDGAR-GEAA. Se indica en gris, las mediciones en superficie respectivas.

Se observó que las variables químicas modeladas a partir del inventario local (EDGAR-GEAA), tienen un mayor grado de correspondencia con las concentraciones observadas por la AQMS. Esto se traduce en mejores valores de las medidas de desempeño estadísticas. Es de interés destacar que el inventario local fue capaz de simular los valores observados de NO<sub>2</sub>

con un buen grado de ajuste, en contraste con el inventario global, el cual subestimó en aproximadamente dos órdenes de magnitud. EDGAR-HTAP otorga valores de emisión en una cuadrícula de aproximadamente 11 x 11 km en tanto que EDGAR-GEAA lo hace 2,5 x 2,5 km. Esta diferencia en la resolución, genera una mejora en la cuantificación de las emisiones de la flota vehicular en una malla más fina permitiendo discriminar los centros urbanos de manera más precisa, lo que explicaría la notable diferencia en los valores simulados. Se encontró la misma tendencia para el caso del PM2.5, en donde nuevamente el modelo global subestimó los valores de campo en aproximadamente dos órdenes de magnitud.

Por otra parte, como el O3 es un contaminante secundario, su química está fuertemente relacionada a los fenómenos fotoquímicos que ocurren en la tropósfera. Por ende, su formación y consumo no dependen estrechamente de los factores de emisión establecidos en el inventario antropogénico, si no, más bien, de los esquemas químicos, de fotólisis y de microfísica establecidos en la configuración. Por lo indicado, el modelado presenta una adecuada correlación entre las concentraciones simuladas y observadas utilizando ambos inventarios. Aun así, es destacable mencionar que las concentraciones deben seguir un perfil diurno y nocturno por su correlación con la radiación solar. El O3 producto de aplicar EDGAR-HTAP, tiende a mostrar un comportamiento de estas características, pero las concentraciones nocturnas no presentan una disminución considerable lo que indica una concentración de fondo sobreestimada por el inventario en relación a lo observado en campo. Esto es notable en las últimas horas del 25 de abril, donde tanto la AQMS como el inventario local mostraron un decaimiento del O3 mientras que el inventario global prácticamente mantuvo su concentración.

La Tabla 2 proporciona el análisis estadístico de las variables químicas simuladas aplicando ambos inventarios de emisiones antropogénicas como datos de entrada. Los valores visualizados en la tabla resultan de la comparación entre las concentraciones registradas por la AQMS promediadas cada 8 h.

Índice estadístico	NO <sub>2</sub>		CO		O <sub>3</sub>		PM2.5	
	global	local	global	local	global	local	global	local
MAE	0,018 ppm	0,009 ppm	0,335 ppm	0,201 ppm	0,015 ppm	0,008 ppm	9,9 µg/m <sup>3</sup>	6,0 µg/m <sup>3</sup>
NMAE	99 %	46 %	78 %	46 %	98 %	47 %	98 %	60 %
RMSE	0,019 ppm	0,011 ppm	0,370 ppm	0,239 ppm	0,016 ppm	0,009 ppm	10,2 µg/m <sup>3</sup>	6,6 µg/m <sup>3</sup>
BIAS	-0,018 ppm	-0,004 ppm	-0,335 ppm	-0,125 ppm	0,015 ppm	0,006 ppm	-9,9 µg/m <sup>3</sup>	-5,5 µg/m <sup>3</sup>
r (a)	0,18	0,29	-0,16	0,37	0,26	0,60	-0,06	0,47

Tabla 2: Medidas estadísticas obtenidas con el inventario global (EDGAR-HTAP) y local (EDGAR-GEAA). (a) El coeficiente de Pearson (r) se calculó contrastando las concentraciones horarias simuladas frente a las concentraciones registradas por el AQMS

El MAE representa la diferencia promedio entre el valor modelado y el observado. Se demostró, que el inventario local simuló concentraciones más cercanas a los valores informados por la AQMS en todas las variables analizadas. Además, se denota que los MAE obtenidos por el inventario global son cercanos al promedio de las concentraciones medidas por la AQMS lo que significó que las discrepancias observadas podían alcanzar órdenes del 100%. Esto se reflejó en los NMAE obtenidos para EDGAR-HTAP que rondó entre 78% a 99%, mientras que para EDGAR-GEAA, entre 46% a 60%. Estos resultados señalaron que el inventario global produjo mayores errores en los casos considerados. El RMSE es un estadístico muy similar al MAE por lo que las conclusiones son semejantes.

En paralelo, el sesgo del modelo (BIAS) mostró una subestimación para NO<sub>2</sub>, CO y PM2.5 y una sobreestimación para el O<sub>3</sub>. La razón de las menores concentraciones estimadas por el modelo ya fue tratada anteriormente. Sin embargo, es de destacar que el sesgo producido por EDGAR-HTAP es ampliamente mayor en todos los casos. Otro dato que se vuelve de relevancia es que el BIAS y el MAE tienen el mismo valor absoluto señalando que el inventario global genera discrepancias asociadas a un error sistemático en el modelado.

Por último, el coeficiente de Pearson ( $r$ ) permite evaluar la capacidad del modelo de simular las concentraciones de campo y su evolución en el tiempo por lo que se decidió contrastar las concentraciones simuladas frente a las medidas hora a hora. Se observó que los valores de ' $r$ ' derivados del modelo utilizando el inventario global reflejaron una baja correlación con las concentraciones de campo. Se denota que para el caso de CO y PM<sub>2.5</sub>, incluso fue negativo demostrando que las concentraciones simuladas no siguen las tendencias relevadas por la AQMS reflejando aleatoriedad. En tanto que, utilizando el inventario local, el modelo devuelve un ' $r$ ' de 0,37 y 0,47 respectivamente, los cuales son considerados aceptables partiendo del criterio de las diferencias de resoluciones ya discutidas previamente. En particular, el O<sub>3</sub> devuelve el ' $r$ ' más alto del presente trabajo lo cual demuestra la posibilidad del modelo de ser utilizado como herramienta de gestión del recurso.

## Conclusiones

Se realizaron simulaciones con el modelo WRF-Chem para la Provincia de Córdoba en condiciones de otoño (abril 2022) para un periodo de una semana con el fin de evaluar diferentes concentraciones con condiciones meteorológicas heterogéneas. Se observó que, entre los dos inventarios, EDGAR-GEAA tiene mejor desempeño en función del análisis estadístico presentado. Las concentraciones simuladas a partir del inventario local como dato de entrada, caen en el rango de los valores reportados por la AQMS con un ' $r$ ' de 0,29, 0,37, 0,60 y 0,47 para NO<sub>2</sub>, CO, O<sub>3</sub> y PM<sub>2.5</sub> respectivamente. En el caso del inventario global, todos los índices estadísticos indican que existen diferencias respecto a los valores reportados por la AQMS. La mejora en la resolución temporal y espacial, en los parámetros de uso de suelo y matriz energética, y la resolución de malla más fina en EDGAR-GEAA probablemente resultaron en la mejora de la calidad de los datos de entrada y, en consecuencia, mayores rendimientos del modelo y menores incertidumbres en las predicciones. A partir de esto, resulta evidente la importancia de incorporar inventarios locales de emisiones al momento de correr el modelo WRF-Chem.

En resumen, WRF-Chem funcionó satisfactoriamente en la región y periodo temporal analizado al aplicar un inventario local con una tendencia general de subestimar los valores de campo. Se espera resolver estas limitaciones del modelo en futuros trabajos y ampliar el periodo meteorológico examinado como los datos de estaciones de monitoreo a comparar.

## Agradecimientos

A la Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Córdoba en la participación de "Becas Doctorales para Docentes de la UTN, para fortalecer las áreas de I+D+i", Res. 326/2022.

## Referencias

- Gao, Y., Zhao, C., Liu, X., Zhang, M. y Leung, L. R. (2014). WRF-Chem simulations of aerosols and anthropogenic aerosol radiative forcing in East Asia. *Atmospheric Environment*, 92, 250-266.
- Grell, G. A., Peckham, S. E., Schmitz, R., McKeen, S. A., Frost, G., Skamarock, W. C. y Eder, B. (2005). Fully coupled "online" chemistry within the WRF model. *Atmospheric environment*, 39(37), 6957-6975.
- Gupta, M. y Mohan, M. (2015). Validation of WRF/Chem model and sensitivity of chemical mechanisms to ozone simulation over megacity Delhi. *Atmospheric Environment*, 122, 220-229.
- INDEC (2016). National population, household and housing census. Recuperado el 23 de abril de 2024 de <https://www.indec.gob.ar/>
- Kumar, R., Naja, M., Pfister, G. G., Barth, M. C., Wiedinmyer, C. y Brasseur, G. P. (2012). Simulations over South Asia using the Weather Research and Forecasting model with Chemistry (WRF-Chem): chemistry evaluation and initial results. *Geoscientific Model Development*, 5(3), 619-648. doi:10.5194/gmd-5-619-2012
- Pepino Minetti, R. C., López, E. G., Fonseca, J. M., Balcaza Pizzi, N., Allende García, M. C. y Poncio, C. (2020). Estado de la calidad del aire de la ciudad de Córdoba: actualización a casi dos décadas de su última evaluación. *Contaminación Atmosférica e Hídrica en Argentina*, V.

Puliafito, S. E., Bolaño-Ortiz, T. R., Fernández, R. P., Berná, L. L., Pascual-Flores, R. M., Urquiza, J., López-Noreña, A. I. y Tames, M. F. (2021). High-resolution seasonal and decadal inventory of anthropogenic gas-phase and particle emissions for Argentina. *Earth System Science Data*, 13(10), 5027-5069.

Resolución Provincial 105 de 2017 [Ministerio de Agua, Ambiente y Servicios Públicos] Aprueba los “Estándares de Aire de la Provincia de Córdoba”. 28 de junio de 2017. Boletín Oficial de la Prov. de Córdoba Año CIV, Tomo DCXXXI, N°127.

Sicard, P., Crippa, P., De Marco, A., Castruccio, S., Giani, P., Cuesta, J., Paoletti, E., Zhaozhong, F. y Anav, A. (2021). High spatial resolution WRF-Chem model over Asia: Physics and chemistry evaluation. *Atmospheric Environment*, 244, 118004.

Tuccella, P., Curci, G., Visconti, G., Bessagnet, B., Menut, L., & Park, R. J. (2012). Modeling of gas and aerosol with WRF/Chem over Europe: Evaluation and sensitivity study. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 117(D3). doi:10.1029/2011JD016302

WHO (2021). Air Pollution. Recuperado el 17 de abril de 2024 de <https://www.who.int/es/news/item/22-09-2021-new-who-global-air-quality-guidelines-aim-to-savemillions-of-lives-from-air-pollution>