

EVALUACIÓN DE LOS ESQUEMAS DE FOTÓLISIS EN EL MODELO WRF-Chem

Guido R. CONTO, Beatriz M. TOSELLI, Gustavo G. PALANCAR

gconto@fcq.unc.edu.ar

Departamento de Físicoquímica/ INFIQC-CONICET, Facultad de Ciencias Químicas,
Universidad Nacional de Córdoba, 5000, Córdoba, Argentina

RESUMEN

Se implementó el modelo WRF-Chem (Weather Research Forecasting coupled with Chemistry) con dominio sobre Sudamérica y centro en la región de Córdoba. Se usaron las bases NCEP-FNL, MEGAN, EDGAR y el mecanismo químico RADM2 con MADE-SORGAM. Se evaluaron los diferentes esquemas de fotólisis (Madronich Scheme, Fast-J y Fast-TUV) realizando tres simulaciones (9-13 Septiembre 2013) y analizando los coeficientes de fotodisociación (J) del ozono (O_3) y del dióxido de nitrógeno (NO_2) a nivel regional, en superficie y en altura. Se observaron sobrestimaciones y subestimaciones en los puntos de grilla con mayor presencia de aerosoles y nubes, lo que revela las diferencias en el tratamiento de los mismos en cada esquema. Para validar los resultados, se usó el modelo de transferencia radiativa TUV v5.3.1 (Tropospheric Ultraviolet Visible) en condiciones de cielo limpio y despejado para calcular la variación horaria de estos coeficientes en la Ciudad de Córdoba. Aquí se observó un buen acuerdo para JNO_2 pero sobrestimaciones de 10% a 30% en los resultados para $JO_3(^1D)$ y $JO_3(^3P)$, lo que puede estar relacionado a las diferentes grillas de longitudes de onda y/o al efecto de las variables meteorológicas (ej: nubes y aerosoles) generadas por el modelo WRF-Chem.

Palabras clave: Coeficientes de fotodisociación, modelo WRF-Chem, modelo TUV.

ABSTRACT

The WRF-Chem model (Weather Research Forecasting coupled with Chemistry) was implemented with the main domain over South America and center on Córdoba region. NCEP-FNL, MEGAN, and EDGAR databases and the RADM2 chemical mechanism with MADE/SORGAM were used. The different photolysis schemes (Madronich Scheme, Fast-J and Fast-TUV) were evaluated through three simulations (9 – 13 September, 2013) and analyzing the photodissociation coefficients (J) of ozone (O_3) and nitrogen dioxide (NO_2) at a regional scale, at surface and aloft. The largest differences (over and underestimations) were observed in places with presence of clouds and/or with high levels of aerosols. To validate the results, the TUV (Tropospheric Ultraviolet Visible) v5.3.1 radiative transfer model was used under clear sky conditions to calculate the daily course of these coefficients in Córdoba City. Here, it was observed a good agreement for JNO_2 but overestimations between 10% and 30% in the results for $JO_3(^1D)$ and $JO_3(^3P)$, what can be related to the different wavelength grids and/or the effect of the meteorological variables (e.g. clouds and aerosols) generated by WRF-Chem model.

Key words: Photodissociation coefficients, WRF-Chem model, TUV model.

1) INTRODUCCIÓN

Los modelos atmosféricos son de suma importancia para comprender y predecir el comportamiento químico de la atmósfera. En estos modelos, los coeficientes de fotodisociación son una parte fundamental para calcular los diferentes procesos químicos y para pronosticar la concentración de especies contaminantes en la atmósfera. De aquí, la gran importancia de reducir los errores en el cálculo de estos coeficientes. En este trabajo se implementó el modelo WRF-Chem (Grell et al, 2005) en la región de Córdoba, para evaluar y cuantificar las diferencias obtenidas según el módulo de fotólisis que se use en la determinación de los coeficientes de fotodisociación de O_3 y NO_2 .

2) METODOLOGÍA

En este trabajo se utilizó la versión 3.8.1 del modelo WRF-Chem. Las simulaciones se realizaron desde el 9 al 13 de Septiembre de 2013, con un dominio padre de 100x140 puntos de grilla, resolución horizontal de 30 km, 27 niveles verticales de presión. Los dos dominios hijos (2 y 3) están centrados en la provincia y la ciudad de Córdoba, respectivamente (Fig 1.). Los esquemas usados para transferencia radiativa, microfísica, capa superficial, capa límite y convecciones fueron RRTM-Goddard, Lin (Purdue), Noah Land Surface, Yonsei University y Grell-Freitas, respectivamente. La información meteorológica se obtuvo de NCEP-FNL, para las emisiones antropogénicas se usó EDGAR-HTPA y para emisiones biogénicas se utilizó MEGAN. También se usó RADM2 como mecanismo químico con MADE/SORGAN (con PM10 y PM2.5) y la herramienta MOZBC para actualizar las condiciones químicas de contorno. Finalmente, se realizaron tres simulaciones, considerando un spin up de 1 día y variando los esquemas de fotólisis Madronich Scheme, Fast-J y Fast-TUV. Para contrastar los resultados, se calculó la variación diaria de $J_{O_3(3P)}$, $J_{O_3(1D)}$ y J_{NO_2} en la ciudad de Córdoba usando el modelo TUV v5.3.1 (Madronich, 1987) con cielo limpio y despejado, método 8-streams, albedo de 5%, grilla de longitudes de onda entre 280 y 420 nm, columna de ozono del instrumento OMI y el perfil de la atmósfera standard de USA.

3) RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La figura 2 muestra los valores del coeficiente de fotodisociación $J_{O_3(1D)}$ (min^{-1}) en superficie para la reacción $O_3 + hv \rightarrow O(^3P) + O_2$ calculados con el esquema Fast-TUV a las 13:00 h del 10 Sep 2013 mientras que la figura 3 muestra las diferencias entre los esquemas Fast J y Fast TUV. Al comparar los 3 esquemas de fotólisis entre sí a nivel regional se observó un buen acuerdo en las zonas de cielo despejado pero grandes sobrestimaciones (mayores al 100%) o subestimaciones en determinados tiempos y puntos de grilla donde se da la formación de nubes o la emisión de aerosoles. El análisis de los campos de nubes, el tratamiento de las mismas que usa cada esquema y la comparación frente al modelo TUV y medidas satelitales posibilitará evaluar y optimizar estos esquemas, lo que permitirá, a su vez, investigar el efecto de variables meteorológicas sobre la química. Todo esto derivará en una mayor exactitud en las predicciones de las concentraciones de especies de interés troposférico.

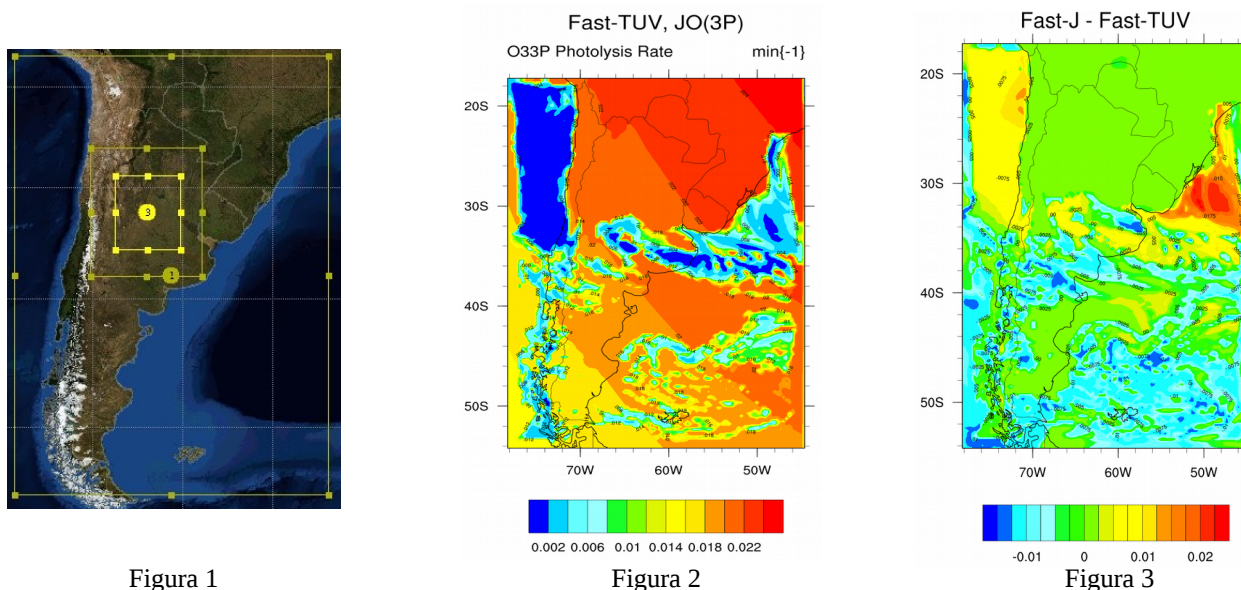


Figura 1

Figura 2

Figura 3

REFERENCIAS

- Grell, G., Peckham, S., Schmitz, R., McKeen S., Frost, G., Skamarock, W., Eder, B., 2005: Fully coupled "online" chemistry within the WRF model. *Atmospheric Environment* 39, 6957–6975.
- Madronich, S., 1987: Photodissociation in the atmosphere 1. Actinic flux and the effects of ground reflections and clouds. *Journal of Geophysical Research*, 92, D8, 9740-9752.