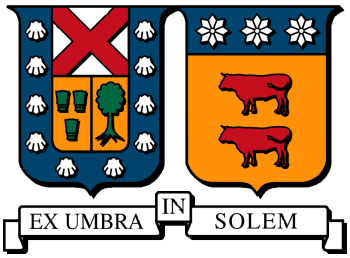
UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
VALPARAÍSO - SANTIAGO, CHILE



Aplicación de datos satelitales para la validación Top-Down/Bottom-Up de las emisiones superficiales de NOx generadas por el sector transporte en Chile (2018 - 2025)

Marcos Daniel Pereira Cofré

Tesis para optar al título de Ingeniería Civil Mecánica y al grado de Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica

Profesor Guía: Dr. Mauricio Osses
Profesor co-Referente: Dr. Joaquín Mura
Profesor externo: Dr. Nicolás Huneeus

Octubre 2026

CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): ☐ Memoria o trabajo de título ☒ Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Aplicación de datos satelitales para la validación Top-Down/Bottom-Up de las emisiones superficiales de NOx generadas por el sector transporte en Chile (2018 - 2025)

Nombre del candidato(a): Marcos Pereira Cofré

Carrera / Grado: Magister en Ciencias de la Ingeniería Mecánica

Campus: Valparaíso **Departamento:** Departamento de Ingeniería Mecánica

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Mauricio Osses Alvarado, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

☒ El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

☐ El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por **(marcar una opción)**:

☐ 6 meses ☐ 12 meses ☐ 2 años ☐ 3 años ☐ 5 años ☐ 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: _____ **Firma:** _____

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: _____ **Firma:** _____

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.

Agradecimientos

A mi familia, que me hace sentir que soy capaz de todo y sabe mejor que nadie cuán feliz estoy de poder nombrarlos y compartir con ellos esta importante etapa de mi vida. A Hernán Pereira, mi papá, e Isaura Cofré, mi mamá, por haberme hecho quien soy y estar ahí cada vez, sin importar las circunstancias. A Leonardo Pereira y Carlos Pereira, mis hermanos, por dejarme guiarlos y apoyarme en las buenas y en las no tan buenas... si mis padres me hicieron como soy, ustedes son los que me hacen querer ser mejor. A Albertina Díaz, mi abuela, por quererme como a un hijo más. A mi tata: va uno de tres, vamos bien.

A mi profesor, Mauricio Osses. Jamás pensé que podría aprender tanto de una sola persona. Muchas gracias por ser un excelente profesor, inmejorable guía y un gran amigo.

A una personita que sin pensarlo apareció por el camino y se hizo uno de mis mejores amigos y un gran colega, Joaquín Fernández.

A mis amigos y colegas, que de directa o indirectamente me han motivado a mejorar como profesional.

Y a mi persona: Valentina Francke. Podría dejar por escrito cuánto significas para mí, pero prefiero demostrártelo cada día... teamoo.

Agradecimientos institucionales

Agradezco al Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico (FONDECYT) por el financiamiento otorgado para la realización de esta investigación a través del Proyecto Fondecyt Regular N°1241477. De igual manera, extiendo mi agradecimiento al Centro de Ciencia del Clima y la Resiliencia (CR2) por el constante respaldo institucional brindado a este trabajo.

Asimismo, expreso mi gratitud a la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID) por el apoyo brindado para la dedicación a mis estudios mediante la Beca Magíster Nacional ANID 2026 N°123456789.

Finalmente, agradezco a la Universidad Técnica Federico Santa María (UTFSM) por el fundamental respaldo económico e institucional entregado durante mi formación. Esto incluye a su Dirección de Postgrado, a través de la Beca de Magíster N° 132/2025, y a su Dirección General de Docencia junto a la Dirección General de Asuntos Estudiantiles, por el financiamiento otorgado mediante el Fondo Concursable Apoyo Viajes Académicos Estudiantiles 2025-1.

Powered@NLHPC: Esta investigación/tesis fue parcialmente apoyada por la infraestructura de supercómputo del NLHPC (CCSS210001).

Resumen

La cuantificación de las emisiones superficiales de óxidos de nitrógeno (NO_x) constituye un desafío crítico para la gestión de la calidad del aire, particularmente en dominios de orografía compleja y alta densidad demográfica como Chile Central. Tradicionalmente, los presupuestos de emisión se han estimado mediante enfoques *Bottom-Up* (como el Inventario Nacional de Emisiones Antropogénicas, INEMA), los cuales se fundamentan en formulaciones estadísticas estáticas y factores de actividad teóricos. Si bien son útiles para la planificación regulatoria, estos métodos contables exhiben falencias sistemáticas al omitir la degradación termodinámica real del parque vehicular, la congestión dinámica y la incertidumbre en la identificación precisa de todas las fuentes de contaminación antropogénica. La presente investigación desarrolla e implementa un modelamiento satelital *Top-Down* basado en el Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA), integrando observaciones espectrométricas de alta resolución del instrumento TROPOMI (Sentinel-5P) con campos cinemáticos y fotoquímicos simulados por el modelo de transporte regional WRF-CHIMERE para el periodo 2018-2025.

Metodológicamente, la investigación resolvió perturbaciones geométricas y radiativas fundamentales. Se demostró que el uso de perfiles verticales *a priori* globales (TM5-MP) subestima las concentraciones medidas por TROPOMI. La convolución numérica de las recuperaciones satelitales con perfiles regionales de CHIMERE permitió corregir el Factor de Masa de Aire (AMF), recuperando hasta un 44 % de la masa troposférica de NO_2 en las matrices urbanas de Santiago y Valparaíso. Posteriormente, para garantizar la conservación rigurosa de la masa y evitar la advección numérica generada por el efecto *bow-tie* de las órbitas polares, el operador diferencial de divergencia espacial se resolvió directamente sobre la malla geométrica nativa (*swath*) del satélite. La traducción de flujos instantáneos a tasas de emisión diarias se abordó mediante la formulación de un Factor de Expansión Diaria ($FED = 16{,}67$), anclado empíricamente a la fenomenología bimodal del sector transporte.

Los resultados espaciales confirman que el algoritmo FDA logra reasignar de manera exitosa la masa gaseosa advectada hacia sus verdaderas coordenadas de origen, revelando *hotspots* altamente compactos sobre la Región Metropolitana, el complejo industrial de Quintero-Puchuncaví y el eje conectivo de la Ruta 5 Sur. La intercomparación cuantitativa anual demostró que, mientras el modelo satelital diverge topológicamente del inventario INEMA en comunas cordilleranas extensas debido a artefactos de intersección de grilla (9×9 km^2), logra una congruencia estructural robusta en núcleos consolidados, capturando simultáneamente fuentes marítimas y procesos logísticos invisibles para los métodos estadísticos convencionales.

Finalmente, la caracterización de la incertidumbre se abordó mediante la propagación analítica de errores en cuadratura. Se constató que la derivada espacial amplifica el ruido instrumental bajo regímenes de vientos extremos, inestabilidad que fue mitigada mediante un esquema dinámico de exclusión cinemática. Se concluye que la teledetección espacial, pese a la pérdida estacional de observaciones por nubosidad invernal, provee una plataforma independiente, física y altamente representativa para auditar los inventarios *Bottom-Up*,

democratizando la vigilancia atmosférica y sentando las bases hacia la futura asimilación de datos de satélites geoestacionarios en el hemisferio sur.

Palabras clave: Emisiones de NO_x, TROPOMI, Divergencia de Flujo (FDA), WRF-CHIMERE, Teledetección Atmosférica, Inventario Top-Down.

Abstract

The accurate quantification of surface nitrogen oxide (NO_x) emissions constitutes a critical challenge for air quality management, particularly in domains characterized by complex orography and high demographic density, such as Central Chile. Traditionally, emission budgets have been estimated using *Bottom-Up* approaches (e.g., the National Anthropogenic Emissions Inventory, INEMA), which rely on static statistical formulations and theoretical activity factors. Although useful for regulatory planning, these accounting methods exhibit systematic shortcomings by omitting the actual thermodynamic degradation of the vehicle fleet, dynamic congestion, and the uncertainty in accurately identifying all anthropogenic pollution sources. This research develops and implements a *Top-Down* satellite modeling framework based on the Flux Divergence Approach (FDA), integrating high-resolution spectrometric observations from the TROPOMI instrument (Sentinel-5P) with kinematic and photochemical fields simulated by the WRF-CHIMERE regional transport model for the 2018-2025 period.

Methodologically, the research resolved fundamental geometric and radiative perturbations. It was demonstrated that the use of global *a priori* vertical profiles (TM5-MP) systematically underestimates the concentrations retrieved by TROPOMI. The numerical convolution of satellite retrievals with regional CHIMERE profiles allowed for the correction of the Air Mass Factor (AMF), recovering up to 44% of the tropospheric NO_2 mass over the urban matrices of Santiago and Valparaíso. Subsequently, to guarantee strict mass conservation and avoid numerical advection artifacts generated by the *bow-tie* effect of polar orbits, the spatial divergence differential operator was solved directly on the satellite's native geometric grid (*swath*). The translation of instantaneous fluxes into daily emission rates was addressed through the formulation of a Daily Expansion Factor ($FED = 16.67$), empirically anchored to the bimodal phenomenology of the transport sector.

Spatial results confirm that the FDA algorithm successfully reassigns the advected gaseous mass to its true coordinates of origin, revealing highly compact *hotspots* over the Santiago Metropolitan Region, the Quintero-Puchuncaví industrial complex, and the Route 5 South connectivity corridor. The annual quantitative intercomparison demonstrated that, while the satellite model topologically diverges from the INEMA inventory in extensive mountainous municipalities due to grid intersection artifacts (9×9 km^2), it achieves robust structural congruence in consolidated urban cores, simultaneously capturing maritime and logistical sources that remain invisible to conventional statistical methods.

Finally, uncertainty characterization was addressed through the analytical propagation of errors in quadrature. It was found that the spatial derivative amplifies instrumental noise under extreme wind regimes, an instability that was mitigated via a dynamic kinematic exclusion scheme (*wind capping*). By applying this temporal filter, the model stabilized the relative error margin of active sources within a strict operational range of 65% to 85%. It is concluded that spatial remote sensing, despite the seasonal loss of observations due to winter cloud cover, provides an independent, physical, and highly representative platform for auditing *Bottom-Up*

inventories, democratizing atmospheric monitoring, and laying the groundwork for the future assimilation of geostationary satellite data in the Global South.

Keywords: NO_x emissions, TROPOMI, Flux Divergence Approach (FDA), WRF-CHIMERE, Atmospheric Remote Sensing, Top-Down Inventory.

Contenidos

Introducción **16**

Hipótesis **18**

Objetivos **18**

1 Marco teórico **19**
1.1 Contaminación atmosférica . . . 20
1.1.1 Emisiones antropogénicas . . . 20
1.1.2 Óxidos de Nitrógeno . . . 21
1.2 Inventarios de emisiones . . . 24
1.2.1 Inventarios internacionales de emisiones . . . 25
1.2.2 Inventario Nacional de Gases de Efecto Invernadero de Chile . . . 26
1.2.3 Inventario Nacional de Emisiones Antropogénicas . . . 27
1.3 Teledetección . . . 29
1.3.1 Observaciones satelitales para calidad del aire . . . 31
1.3.2 Instrumento de Monitoreo Troposférico . . . 32
1.3.3 Usos de TROPOMI en Chile . . . 33
1.4 Métodos para estimar emisiones a partir de observaciones satelitales . . . 35
1.4.1 Modelos de Transporte Químico en la estimación de emisiones . . . 36
1.4.2 Enfoque de Divergencia de Flujo . . . 37
1.5 Análisis de incertidumbre . . . 38
1.6 Síntesis . . . 39

2 Datos y Metodología **41**
2.1 Fuentes de datos . . . 43
2.1.1 Observaciones satelitales . . . 43
2.1.2 Datos meteorológicos y simulaciones de CTM . . . 43
2.1.3 Inventario Nacional de Emisiones Antropogénicas . . . 43
2.2 Área y periodo de estudio . . . 44
2.2.1 Delimitación del dominio espacial . . . 44
2.2.2 Definición del dominio temporal . . . 46
2.3 Preprocesamiento de datos . . . 47
2.3.1 Homogeneización de la resolución espacial . . . 48
2.3.2 Reemplazo del perfil a priori de TROPOMI . . . 48

2.3.3 La Capa Límite Planetaria (PBL) . . . 50
2.4 Implementación del Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA) . . . 50
2.4.1 Estimación preliminar mediante Modelo de Caja . . . 50
2.4.2 Ecuación de Conservación de masa espacial . . . 51
2.4.3 Discretización espacial y cálculo de la divergencia . . . 51
2.4.4 Parametrización de la fotoquímica . . . 52
2.4.5 Rotación del campo de viento al swath del satélite . . . 53
2.4.6 Conversión de unidades y conservación de masa . . . 54
2.4.7 Variabilidad diurna y Factor de Expansión Diaria (FED) en el modelo FDA . . . 54
2.5 Análisis de sensibilidad e incertidumbre . . . 55
2.5.1 Variabilidad espacio-temporal . . . 55
2.5.2 Propagación analítica de incertidumbre . . . 57
2.6 Entorno computacional y herramientas de análisis . . . 59
2.7 Síntesis del capítulo . . . 60

3 Aplicación del modelo de Divergencia de Flujo (FDA) y estimación de emisiones 61
3.1 Observaciones satelitales de NO_2 . . . 62
3.1.1 Proceso de descarga . . . 62
3.1.2 Validación visual . . . 63
3.2 El perfil vertical a priori . . . 65
3.2.1 Reemplazo del perfil a priori de TROPOMI con CHIMERE . . . 66
3.2.2 Aplicación del perfil a priori 2019 a todo el periodo de estudio . . . 68
3.3 Parametrización de los términos físicos de la ecuación FDA . . . 70
3.3.1 Dinámica estacional de los campos de viento y transporte espacial . . . 70
3.3.2 Variabilidad espacio-temporal del tiempo de vida químico . . . 72
3.3.3 Comportamiento del factor de partición . . . 73
3.3.4 Impacto integrado de la parametrización en el modelo FDA . . . 75
3.4 Resultados del modelo: Inventario de emisiones Top-Down espacio-temporal . . . 76
3.4.1 Análisis de los patrones espaciales y localización de hotspots . . . 76
3.4.2 Evaluación de la variabilidad estacional y estabilidad de la inversión . . . 78
3.4.3 Disponibilidad de datos y reproducibilidad del inventario . . . 79
3.5 Síntesis . . . 80

4 Intercomparación, análisis de variabilidad y propagación de errores 81
4.1 Intercomparación de inventarios . . . 82
4.1.1 Evaluación del dominio de estudio . . . 82
4.1.2 Evaluación a escala comunal: Región Metropolitana y Región de Valparaíso . . . 83
4.2 Análisis de variabilidad temporal a nivel puntual . . . 88

4.2.1 Dinámica temporal en matriz urbana: Centro de Santiago 88
4.2.2 Dinámica temporal en matriz costera/industrial: Puerto de Valparaíso 89
4.2.3 Dinámica temporal en zona de control 89
4.3 Propagación de errores y evaluación de incertidumbre 91
4.3.1 Cuantificación de la incertidumbre espacial y propagación del error en el modelo FDA 91
4.3.2 Evaluación del desempeño del modelo y precisión de las detecciones satelitales . . . 94
4.4 Síntesis 94

Conclusiones y recomendaciones **96**
Conclusiones generales 96
Conclusiones específicas 97
Recomendaciones 98

A Observaciones satelitales **106**
A.1 Descarga de datos 107

B Aplicación del modelo FDA **109**
B.1 Componentes y resultados promediados mensualmente 110

C Intercomparación entre inventarios **116**
C.1 Emisiones comunales de NO_x 117
C.2 Series de tiempo de la variabilidad diaria de emisiones de NOx en los tres puntos de interés . 120

Índice de figuras

1.1 Esquema que ejemplifica los tipos de fuentes de emisiones antropogénicas. Generado con IA Gemini. 21
1.2 Isopletas de concentraciones de O_3 en función de NO_x y COV, mostrando los regímenes limitados por cada precursor [Parra, 2017]. 22
1.3 Emisiones de NO_x del sector transporte en Chile según inventarios internacionales e inventario nacional INEMA (que se explicará más adelante) [Campos, 2025]. 26
1.4 Emisiones de gases de efecto invernadero del sector transporte en Chile reportadas por el Inventario Nacional de Gases de Efecto Invernadero [Ministerio del Medio Ambiente, 2024b]. 27
1.5 Tendencia de las emisiones totales anuales de gas de escape de NOx según tipo de vehículo en Chile, 1990-2020 [Osses et al., 2022]. 28
1.6 Satélite Sentinel-5P [Agencia Espacial Europea, 2026a]. 33
1.7 Promedio de las emisiones de NOx el año 2019 en Sudamérica derivadas de TROPOMI estimadas mediante el algoritmo DECSO [European Space Agency, 2020]. 34
1.8 Serie temporal de las concentraciones superficiales de NO_2 derivadas de TROPOMI (Rojo) y SINCA (Azul), en la estación Parque O'Higgins, Región Metropolitana [Fernández, 2026]. 35

2.1 Diagrama de flujo de la metodología utilizada para la estimación de emisiones de NO_x. La leyenda de colores es la siguiente: las fuentes de datos externos se indican en azul, los procesos y cálculos matemáticos en amarillo, y los resultados o inventarios finales en rojo. 42
2.2 Mapa del área de estudio denominada "Chile Central". 45
2.3 Mapa de la ubicación de los puntos de interés para el análisis de variabilidad que se detallará más adelante en este capítulo. 46
2.4 Línea de tiempo del periodo de estudio, indicando la disponibilidad de datos satelitales y las restricciones asociadas al acoplamiento con el modelo de transporte químico. 47

3.1 Mapa de la columna troposférica de NO_2 medida por TROPOMI filtrada por aseguramiento de calidad ($qa\_value > 0.75$) para el 1 de enero de 2019 en A) Chile continental y B) Chile central. 64
3.2 Evidencia de la distorsión geométrica diaria de la grilla de TROPOMI sobre Chile Central. A): Pasada cercana al nadir del instrumento (1 de enero de 2019). B): Pasada capturada en el extremo del barrido del sensor (15 de enero de 2019), evidenciando el ensanchamiento e inclinación de los píxeles (efecto *bow-tie*). 65
3.3 Columna troposférica de NO_2 de TROPOMI en Chile central para el 1 de enero de 2019. A) Perfil original TM5-MP, B) perfil mejorado con CHIMERE, C) diferencia B-A. 66

3.4 Comparación entre las columnas troposféricas de NO_2 con perfiles original (TM5) y modificado (CHIMERE) en Chile central para el 1 de enero de 2019. A) Histograma de frecuencias, y B) dispersión y regresión lineal de los puntos 67
3.5 Gráficos de dispersión de las columnas troposféricas de NO_2 de TROPOMI para los meses disponibles del año 2018 modificadas usando simulaciones CHIMERE 2018 y CHIMERE 2019. 68
3.6 Evolución de la variación relativa promedio interanual al reemplazar el perfil a priori de la columna troposférica de NO2 original (modelo TM5-MP) con el de CHIMERE. 70
3.7 Campos de viento promediados verticalmente dentro de la PBL para dos meses contrastantes del año 2019: enero, como representante del período estival, y julio, como representante del período invernal. 71
3.8 Tiempo de vida medio promediado verticalmente dentro de la PBL para dos meses contrastantes del año 2019: A) enero, como representante del período estival; y B) julio, como representante del período invernal. 72
3.9 Variabilidad mensual del tiempo de vida químico τ del NO_x en horas durante el año 2019. . 73
3.10 Factor de partición promediado verticalmente dentro de la PBL para dos meses contrastantes del año 2019: A) enero, como representante del período estival; y B) julio, como representante del período invernal. 74
3.11 Promedio mensual de las emisiones de NO_x en $kg \cdot h^{-1}$ estimadas mediante FDA-TROPOMI proyectadas en la grilla de CHIMERE $9 \times 9 km^2$, en Chile Central para enero de 2019. A) Término de sumidero; B) Término de transporte o divergencia; y C) Emisiones totales de NO_x. 75
3.12 Promedio mensual de las emisiones de NO_x estimadas mediante FDA a partir de la columna troposférica de NO_2 de TROPOMI proyectadas en la grilla de CHIMERE 9x9 km2, en Chile central para el año 2019 completo. 77
3.13 Contraste entre los promedios mensuales de las emisiones estimadas en Chile central para los meses de A) enero, y B) julio. 78

4.1 Emisiones anuales de NO_x en Chile Central en 2019. A) inventario INEMA, B) inventario FDA, C) modelo de caja simplificado. 82
4.2 Emisiones anuales de NO_x en la Región Metropolitana en 2019. A) inventario INEMA, B) inventario FDA, C) modelo de caja simplificado. 83
4.3 Emisiones anuales de NO_x en la Región de Valparaíso en 2019. A) inventario INEMA, B) inventario FDA, C) modelo de caja simplificado. 83
4.4 Aplicación de un factor de ajuste en la columna troposférica de NO2 de TROPOMI para el año 2019. En rojo se muestra la columna original de TROPOMI, en azul la columna simulada de CHIMERE y en verde la columna corregida de TROPOMI. 84
4.5 Emisiones anuales de NO_x en las Regiones Metropolitana y de Valparaíso, según los 3 inventarios analizados. 85

4.6 Evolución temporal de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante el año 2019 en 3 puntos de interés analizados. 90
4.7 Dispersión mensual de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante el año 2019 en 3 puntos de interés analizados. 90
4.8 Función de distribución empírica a nivel estacional de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante el año 2019 en 3 puntos de interés analizados. 91
4.9 Distribución espacial de la incertidumbre relativa mensual promedio (%) del inventario Top-Down de NO_x calculado mediante la propagación analítica de errores en cuadratura para el dominio de Chile Central en el año 2019. 92
4.10 Evolución anual de la incertidumbre relativa mensual promedio (%) del inventario Top-Down de NO_x calculado mediante la propagación analítica de errores en cuadratura para el dominio de Chile Central en el año 2019. 93

A.1 Mapa de la columna troposférica de NO_2 de TROPOMI para el 1 de enero de 2019 en Chile continental: A) con filtro de calidad $qa > 0.75$ y B) sin filtro de calidad $qa > 0$. 107
A.2 Evidencia de las diferencias en los barridos orbitales de TROPOMI sobre el dominio de estudio (cuadro rojo). A): 1 de enero de 2019, B): 8 de enero de 2019, y C): 16 de enero de 2019. 108

B.1 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para enero de 2019. 110
B.2 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para febrero de 2019. 110
B.3 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para marzo de 2019. 111
B.4 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para abril de 2019. 111
B.5 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para mayo de 2019. 112
B.6 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para junio de 2019. 112
B.7 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para julio de 2019. 113
B.8 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para agosto de 2019. 113
B.9 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para septiembre de 2019. 114

B.10 Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para octubre de 2019. 114
B.11 Resultados promedios mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para noviembre de 2019. 115
B.12 Resultados promedios mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para diciembre de 2019. 115

C.1 Evolución temporal de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante enero de 2019 en 3 puntos de interés analizados 120
C.2 Evolución temporal de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante febrero de 2019 en 3 puntos de interés analizados 120
C.3 Evolución temporal de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante marzo de 2019 en 3 puntos de interés analizados. 121

Índice de tablas

1.1 Resumen de las reacciones químicas de los NO_x y principales efectos. Adaptado de [Fernández, 2026] . . . 24
1.2 Resumen de las principales misiones de Copernicus y NASA según aplicaciones. [Fernández, 2026] . . . 32
1.3 Resumen de las características del satélite Sentinel-5P [Agencia Espacial Europea, 2026b]. . . 33

3.1 Estadísticas de validación por mes. . . . 69
3.2 Comparación de los parámetros físicos estimados en este estudio (Chile Central) con valores de referencia reportados en la literatura científica para latitudes medias. . . . 75

4.1 Comparación de emisiones estimadas (Gg/año) para las 5 comunas de mayor área superficial en la Región Metropolitana durante 2019. Inventarios INEMA (I), TROPOMI (T) y TROPOMI ajustado (TA). . . . 86
4.2 Comparación de emisiones estimadas (Gg/año) para las 5 comunas de menor área superficial en la Región Metropolitana durante 2019. Inventarios INEMA (I), TROPOMI (T) y TROPOMI ajustado (TA). . . . 86
4.3 Comparación de emisiones estimadas (Gg/año) para las 5 comunas de mayor área superficial en la Región de Valparaíso durante 2019. Inventarios INEMA (I), TROPOMI (T) y TROPOMI ajustado (TA). . . . 87
4.4 Comparación de emisiones estimadas (Gg/año) para las 5 comunas de menor área superficial en la Región de Valparaíso durante 2019. Inventarios INEMA (I), TROPOMI (T) y TROPOMI ajustado (TA). . . . 87
4.5 Resumen anual de emisiones promedio, error absoluto e incertidumbre relativa estacional calculada mediante el modelo FDA para el año 2019 (Filtro de emisión activa > 2.0 kg/h). . 93

C.1 Consolidado de emisiones estimadas (Gg/año) para todas las comunas de la Región Metropolitana. . . . 117
C.2 Consolidado de emisiones estimadas (Gg/año) para todas las comunas de la Región de Valparaíso. . . . 119

Introducción

Respirar en el valle central de Chile es, desde una perspectiva termodinámica, habitar en el fondo de una trampa topográfica. Atrapada entre la inmensidad de la Cordillera de los Andes, la barrera natural de la Cordillera de la Costa y sometida al persistente aplastamiento del Anticiclón del Pacífico Sudeste, la atmósfera de la zona central de Chile experimenta regímenes de ventilación sumamente restrictivos. En este escenario geográfico, el crecimiento demográfico, la expansión de los polos logísticos portuarios y, fundamentalmente, la explosión del parque automotriz, han transformado a las ciudades de la región en reactores fotoquímicos a cielo abierto. Entre los subproductos más críticos de este metabolismo urbano destacan los óxidos de nitrógeno (NO_x), gases de vida corta generados por la combustión a alta temperatura que no solo actúan como precursores mortales del ozono troposférico y el material particulado fino ($MP_{2.5}$), sino que representan un riesgo directo y silencioso para la salud pública.

Frente a esta amenaza, surge una interrogante ingenieril ineludible: *¿Cómo sabemos realmente cuánto contaminante estamos inyectando a la atmósfera?* Durante décadas, la respuesta de los organismos regulatorios ha recaído en los inventarios de emisiones convencionales o de base ascendente (*Bottom-Up*), como el Inventario Nacional de Emisiones Antropogénicas (INEMA) en Chile. Estos sistemas estiman la contaminación multiplicando niveles teóricos de actividad (ej. kilómetros recorridos o combustible vendido) por factores de emisión de laboratorio. Sin embargo, la atmósfera real no obedece a las matemáticas de un escritorio contable. Los inventarios *Bottom-Up* sufren de una rigidez estructural intrínseca: son ciegos ante la obsolescencia no declarada de los motores, ignoran la congestión dinámica de las horas punta, omiten el desgaste de los sistemas de post-tratamiento catalítico y, a menudo, no logran mapear la vasta red de fuentes informales, maquinaria fuera de ruta (*off-road*) o embarcaciones marítimas en tránsito.

La necesidad de auditar la realidad física de nuestras emisiones ha impulsado un salto tecnológico sin precedentes hacia el espacio. Con el lanzamiento del satélite Sentinel-5 Precursor y su espectrómetro TROPOMI, la Agencia Espacial Europea (ESA) inauguró la era de la monitorización atmosférica hiperresuelta. Por primera vez en la historia, es posible observar la huella digital del dióxido de nitrógeno (NO_2) a escala de barrio urbano, todos los días y en cualquier parte del globo. No obstante, una imagen satelital no es un mapa de emisiones; es la fotografía de una pluma gaseosa que ha sido arrastrada por los vientos superficiales y que se encuentra en pleno decaimiento químico. Extraer la coordenada exacta de la chimenea o de la autopista que generó ese gas requiere aplicar ingeniería inversa sobre la mecánica de fluidos de la troposfera, transitando desde la observación empírica hacia la estimación *Top-Down* (descendente).

Es precisamente en este desafío donde se enmarca la presente tesis de Magíster. El objetivo central de esta investigación es desarrollar, adaptar computacionalmente y validar el modelo físico de Divergencia de Flujo (FDA) para estimar las emisiones superficiales de NO_x en Chile Central a partir de los datos espaciales de TROPOMI. Resolviendo explícitamente la ecuación de conservación de masa atmosférica e integrando la cinética química y los campos vectoriales de viento del modelo numérico regional WRF-CHIMERE, este

trabajo busca reasignar geométricamente la masa de contaminante dispersa hacia sus verdaderas fuentes de origen antrópico.

A lo largo de sus capítulos, este documento abordará las complejidades técnicas de operar en el límite de las capacidades satelitales. Se presentarán soluciones analíticas a problemas estructurales de la teledetección, tales como la corrección del efecto de distorsión orbital, el blindaje del algoritmo ante vientos extremos, y la imperativa necesidad de reemplazar los perfiles verticales atmosféricos globales por simulaciones que sí comprendan la subsidencia andina. Finalmente, los resultados topológicos de la plataforma FDA se someterán a una exhaustiva intercomparación frente a la contabilidad oficial de INEMA.

En última instancia, este trabajo no busca reemplazar los sistemas de gestión ambiental existentes, sino dotar a Chile y al sur global de un "puente tecnológico". A través del modelamiento satelital abierto y reproducible, se propone una herramienta empírica de auditoría continua, capaz de democratizar el acceso a la vigilancia atmosférica y garantizar que las futuras políticas de descontaminación se construyan sobre la física real de nuestras ciudades y no solo sobre el papel.

Hipótesis

La determinación de emisiones generadas por el sector transporte, utilizando datos satelitales Top-Down de alta resolución espacio-temporal, permite intercomparar y evaluar la incertidumbre de los inventarios y modelos Bottom-Up existentes.

Objetivos

General

Evaluar la incertidumbre de las emisiones de óxidos de nitrógeno NO_x del sector transporte en Chile durante el periodo 2018-2025, mediante la intercomparación entre inventarios de emisiones disponibles y datos satelitales.

Específicos

1. Realizar una recopilación de emisiones Bottom-Up de NO_x generadas por el sector transporte para Chile durante el periodo 2018-2025.
2. Procesar los datos satelitales de columna troposférica de NO_x proporcionados por TROPOMI para Santiago y Valparaíso, durante el periodo 2018-2025.
3. Determinar la distribución espacio-temporal de las emisiones de NO_x mediante la información de TROPOMI para Santiago y Valparaíso, durante el periodo 2018-2025.
4. Realizar una intercomparación Top-Down/Bottom-Up de la información satelital obtenida y los inventarios existentes.
5. Evaluar la incertidumbre de las emisiones de NO_x generadas por el sector transporte, durante el periodo 2018-2025.

Capítulo 1

Marco teórico

El estudio y la mitigación de la contaminación del aire requieren una comprensión integral de los procesos físicos y químicos que rigen la atmósfera, así como de las herramientas disponibles para cuantificarlos. Este capítulo establece los fundamentos teóricos que sustentan la investigación. Se inicia con una revisión de la contaminación atmosférica, con especial énfasis en las emisiones antropogénicas y la dinámica de los óxidos de nitrógeno. Posteriormente, se analizan los inventarios de emisiones, que constituyen la aproximación "Bottom-Up" tradicional, para luego dar paso a las técnicas modernas de teledetección satelital. Finalmente, se describen los modelos de transporte químico y los métodos matemáticos de inversión que permiten cerrar la brecha entre las observaciones espaciales y las estimaciones locales de emisión, proporcionando el sustento metodológico para la intercomparación abordada en este trabajo.

1.1. Contaminación atmosférica

La contaminación atmosférica se define como la presencia en el aire de materias o formas de energía que implican riesgo, daño o molestia grave para las personas y bienes de cualquier naturaleza. El origen de estos contaminantes determina su clasificación primaria en dos grandes grupos: emisiones biogénicas y emisiones antropogénicas. Las emisiones biogénicas provienen de fuentes naturales no controladas por el ser humano, como erupciones volcánicas, aerosoles marinos, resuspensión de polvo eólico y compuestos orgánicos volátiles emitidos por la vegetación. Por su parte, las emisiones antropogénicas son consecuencia directa de las actividades humanas y constituyen el principal foco de las políticas de gestión de calidad del aire a nivel global.

1.1.1. Emisiones antropogénicas

Las emisiones de origen antrópico son el resultado de la industrialización, la urbanización y la creciente demanda energética. Para facilitar su estudio y regulación, estas emisiones se clasifican según la naturaleza de su fuente:

- **Fuentes fijas**: Instalaciones estacionarias que emiten contaminantes desde un punto específico, como chimeneas de plantas termoeléctricas, refinerías e industrias manufactureras.
- **Fuentes móviles**: Vehículos de combustión interna que se desplazan emitiendo contaminantes a lo largo de su trayectoria. Constituyen el sector transporte (automóviles, camiones, buses, trenes y aviones).
- **Fuentes de área**: Múltiples fuentes pequeñas y difusas que, individualmente, no son significativas, pero en conjunto generan un impacto considerable (ej. calefacción residencial por leña, quemas agrícolas).

Los principales compuestos emitidos por estas fuentes incluyen el dióxido de carbono (CO_2), el cual es el principal gas de efecto invernadero, y los contaminantes criterio: monóxido de carbono (CO), material particulado fino y grueso ($MP_{2.5}$ y MP_{10}), dióxido de azufre (SO_2) y compuestos orgánicos volátiles (COV). Estos últimos, junto con los óxidos de nitrógeno (NO_x), actúan como precursores del ozono troposférico (O_3), un contaminante secundario altamente tóxico.

En un estudio realizado por Nawaz et al. se estima que 2490 muertes prematuras relacionadas con $MP_{2.5}$ y O_3, y 5350 nuevos casos de asma pediátrica relacionados con NO_2 estuvieron asociados con la exposición a la contaminación en Santiago (de Chile) en 2015 y que la mayoría de estos impactos en la salud fueron atribuibles a emisiones antropogénicas. [Nawaz et al., 2023]

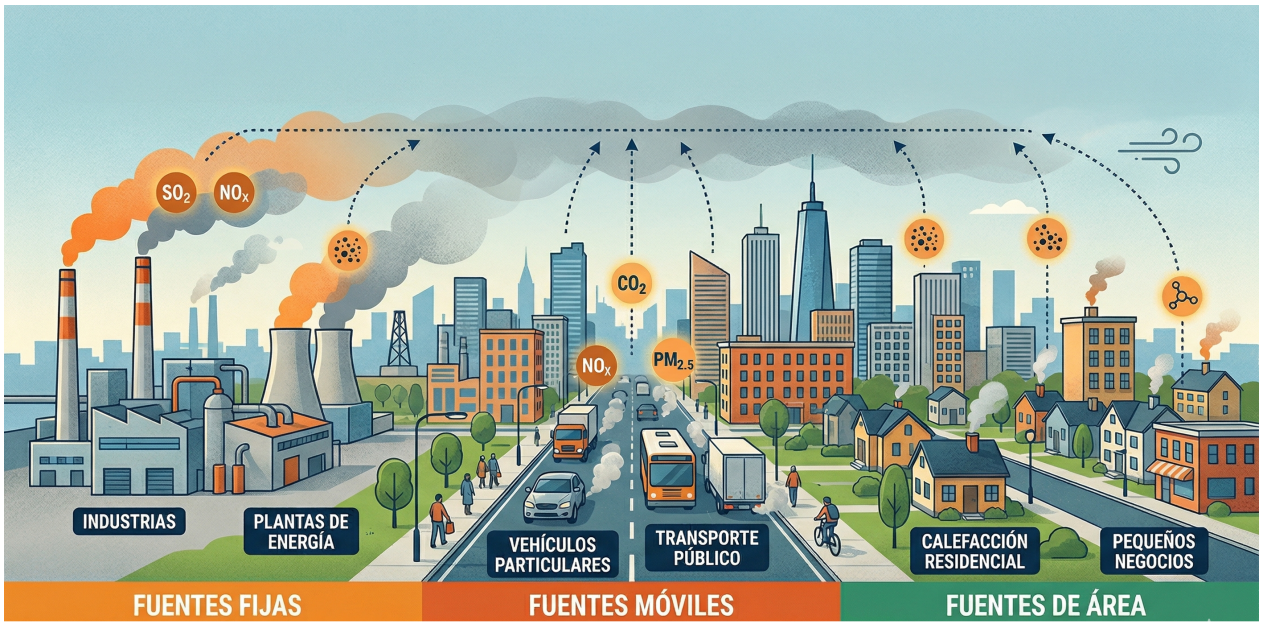


Figura 1.1: Esquema que ejemplifica los tipos de fuentes de emisiones antropogénicas. Generado con IA Gemini.

1.1.2. Óxidos de Nitrógeno

Los óxidos de nitrógeno (NO_x) representan a una familia de gases altamente reactivos, compuesta principalmente por el óxido nítrico (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO_2). A temperatura ambiente, el NO_2 es un gas de color marrón rojizo con un olor irritante. En la tropósfera, los NO_x son fundamentales en la química atmosférica, ya que dominan la formación de ozono fotoquímico y contribuyen a la formación de lluvia ácida y material particulado secundario.

En zonas urbanas e interurbanas, las altas temperaturas de combustión facilitan la reacción del nitrógeno y oxígeno atmosférico. Por ello, el sector transporte, impulsado por motores de combustión interna (particularmente vehículos diésel de carga pesada y transporte de pasajeros), es la fuente antropogénica dominante de NO_x. La corta vida media del NO_2 en la atmósfera inferior (del orden de horas) hace que sus concentraciones se ubiquen muy cerca de sus fuentes de emisión, convirtiéndolo en un trazador ideal para mapear rutas de transporte y actividades urbanas.

La fotólisis del NO_2 por radiación solar inicia el ciclo del ozono, según las siguientes reacciones:

$$NO_2 + hv \longrightarrow NO + O$$
$$O + O_2 \longrightarrow O_3 + M$$

Posteriormente, el NO reacciona con el ozono para regenerar el NO_2, estableciendo un estado fotoestacionario:

$$NO + O_3 \longrightarrow NO_2 + O_2$$

Este proceso es fundamental para comprender la dinámica de los contaminantes atmosféricos, particularmente en entornos urbanos. Según un estudio realizado por René Parra (2017), esta reacción explica por qué, en ausencia de compuestos orgánicos volátiles (COV) suficientes, el O_3 se combina con el NO para regenerar NO_2 y O_2, actuando efectivamente como un sumidero de ozono.

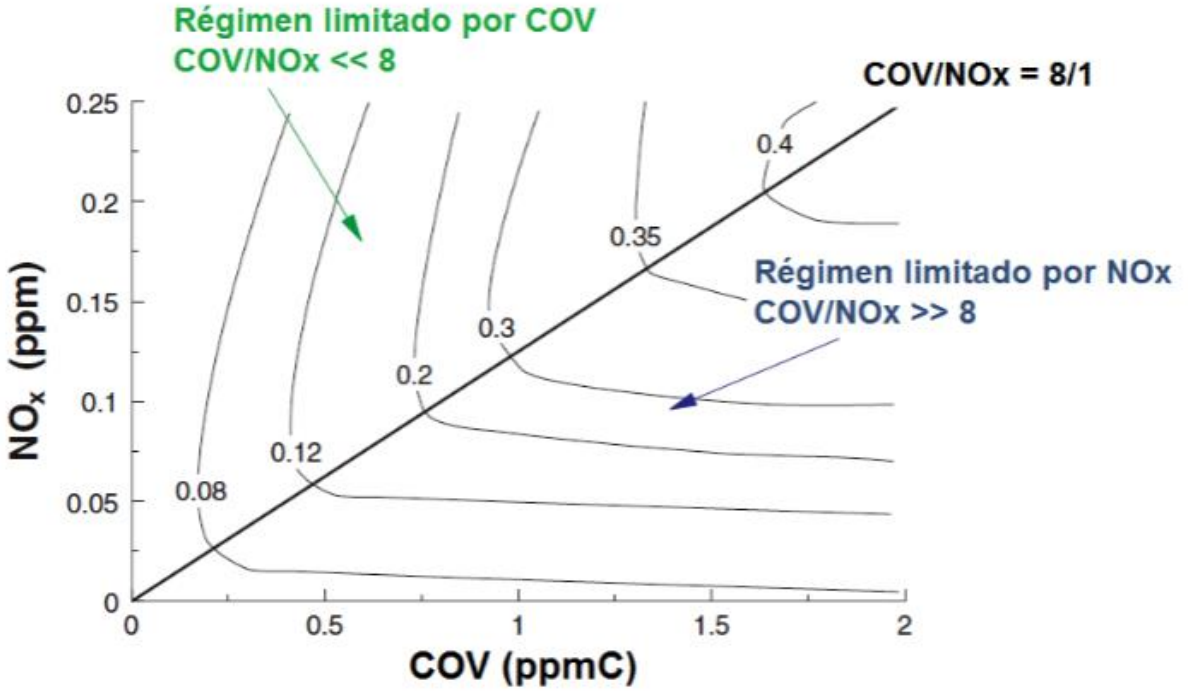


Figura 1.2: Isopletas de concentraciones de O_3 en función de NO_x y COV, mostrando los regímenes limitados por cada precursor [Parra, 2017].

Este fenómeno se hace evidente al observar el "Efecto Fin de Semana", donde la reducción de las emisiones de precursores como el NO_x (debido a la disminución del tráfico vehicular los fines de semana) resulta paradójicamente en concentraciones de O_3 iguales o superiores a las de los días laborables. Esto ocurre porque, al haber menos NO disponible para reaccionar con el ozono, se reduce la destrucción de este contaminante secundario en la superficie, permitiendo su acumulación a pesar de las menores emisiones globales.

Los Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs) alteran el ciclo fotoestacionario al generar radicales peroxi

(RO_2, HO_2) que oxidan el NO a NO_2 sin consumir ozono:

$$RO_2 + NO \longrightarrow NO_2 + RO^{\bullet}$$
$$HO_2 + NO \longrightarrow NO_2 + OH^{\bullet}$$

Esta vía alternativa rompe el equilibrio y permite la acumulación neta de ozono troposférico.

Por otro lado, el NO_2 actúa como precursor crucial en la formación de especies secundarias atmosféricas. Durante el día, el NO_2 reacciona con el radical hidroxilo (OH):

$$NO_2 + OH^{\bullet} \longrightarrow HNO_3$$

El HNO_3 gaseoso es un precursor de partículas secundarias y componente fundamental de la deposición ácida (o lluvia ácida).

El ácido nítrico reacciona con amoníaco atmosférico:

$$HNO_3 + NH_3 \longrightarrow NH_4NO_3$$

El nitrato de amonio (HN_4NO_3) es un componente significativo del $MP_{2.5}$, siendo altamente soluble e higroscópico. Las partículas nucleadas (<0.1 µm) actúan como superficies de condensación, facilitando el crecimiento hacia el rango de acumulación, proceso fundamental en la formación de smog invernal y la reducción de visibilidad [Pathak et al., 2009].

Finalmente, los peroxiacilnitratos (PANs) se forman mediante la reacción de NO_2 con radicales derivados de COVs. Estos actúan como reservorios de NO_x, transportando contaminantes a largas distancias antes de descomponerse por calor, liberando precursores de ozono en zonas remotas [Wang et al., 2023].

Tabla 1.1: Resumen de las reacciones químicas de los NO_x y principales efectos. Adaptado de [Fernández, 2026]

Reacción simplificada	**Descripción**	**Efecto**
$NO_2 + hv \longrightarrow NO + O$	Fotólisis (luz UV)	Inicia la producción de smog fotoquímico
$O + O_2 \longrightarrow O_3$	Reacción con oxigeno del aire	Formación de ozono troposférico
$NO + O_3 \longrightarrow NO_2 + O_2$	Regeneración de NO_2	Establece un estado fotoestacionario
$RO_2 + NO \longrightarrow NO_2 + RO$	Reacción con radicales peroxi	Acumulación de O_3 (rompe el estado fotoestacionario)
$NO_2 + OH \longrightarrow HNO_3$	Oxidación diurna	Formación de lluvia ácida y eliminación de NO_x del aire
$HNO_3 + HN_3 \longrightarrow HN_4NO_3$	Neutralización	Formación de $MP_{2.5}$ secundario
$NO_2 + COVs \longrightarrow PAN$	Formación de reservorios	Transporte de contaminación a zonas rurales/lejanas, irritación ocular.

En síntesis, el análisis de la dinámica química y física de los óxidos de nitrógeno revela por qué el NO_2 constituye el trazador atmosférico idóneo para los objetivos de esta investigación. Dada su alta reactividad fotoquímica y corta vida media en la tropósfera, las moléculas de NO_2 no experimentan una dispersión regional a gran escala antes de transformarse, lo que garantiza que las concentraciones observadas se mantengan espacialmente acopladas a sus fuentes originarias, predominantemente el sector transporte. Para efectos de esta tesis, la comprensión detallada de sus sumideros (como la oxidación por radicales OH) resulta indispensable, puesto que el tiempo de vida química de la especie es un parámetro físico crítico para estimar las emisiones de NO_x. Consecuentemente, la caracterización del NO_x justifica su elección como indicador y asegura la validez termodinámica de estimar tasas de emisión superficiales a partir de la densidad de columna troposférica.

1.2. Inventarios de emisiones

Los inventarios de emisiones son bases de datos estructuradas que cuantifican la masa de contaminantes liberados a la atmósfera en un área geográfica y un periodo determinado. Estas herramientas se basan predominantemente en un enfoque Bottom-Up, donde las emisiones se estiman multiplicando los datos de actividad (ej. litros de combustible consumido, kilómetros recorridos) por factores de emisión específicos. Si bien existen inventarios globales como "Emissions Database for Global Atmospheric Research (EDGAR)" o el inventario de "Copernicus Atmosphere Monitoring Service (CAMS)", la gestión territorial recae en los

inventarios nacionales, los cuales se adaptan a las particularidades tecnológicas y normativas locales.

1.2.1. Inventarios internacionales de emisiones

Los principales inventarios internacionales de emisiones disponibles para Chile, según Campos, son EDGAR, CEDS y CAMS [Campos, 2025]. A continuación se describe cada uno:

EDGAR

- Nombre: Emissions Database for Global Atmospheric Research (EDGAR).
- Gases reportados: GEI, SO_2, NO_x, CO, COVNM, NH_3, MP_{10} y $MP_{2.5}$, BC, OC.
- Cobertura temporal: Sus registros inician desde el año 1970. La versión v4.3.2 cubre el periodo 1970-2012, las versiones v5 y v6 amplian los datos hasta 2015 y 2018 respectivamente. Las versiones más reciente v7 y v8 se enfocan exclusivamente en GEI y abarca desde 1970 hasta 2021 y 2022 respectivamente.

CEDS

- Nombre: Community Earth-atmosphere Data System (CEDS).
- Gases reportados: GEI, SO_2, NO_x, CO, COVNM, NH_3, MP_{10} y $MP_{2.5}$, BC, OC.
- Cobertura temporal: Su versión más reciente abarca desde el año 1950 hasta 2023.

CAMS

- Nombre: Copernicus Atmosphere Monitoring System (CAMS).
- Gases reportados: GEI, SO_2, NO_x, CO, COVNM, NH_3, MP_{10} y $MP_{2.5}$, BC, OC.
- Cobertura temporal: Sus versiones globales (CAMS-GLOB-ANT v5.3 y v6.2) cubren desde el año 2000 hasta 2024.

Las emisiones de NO_x reportadas para el sector transporte por los inventarios internacionales para Chile se presentan en la figura 1.3

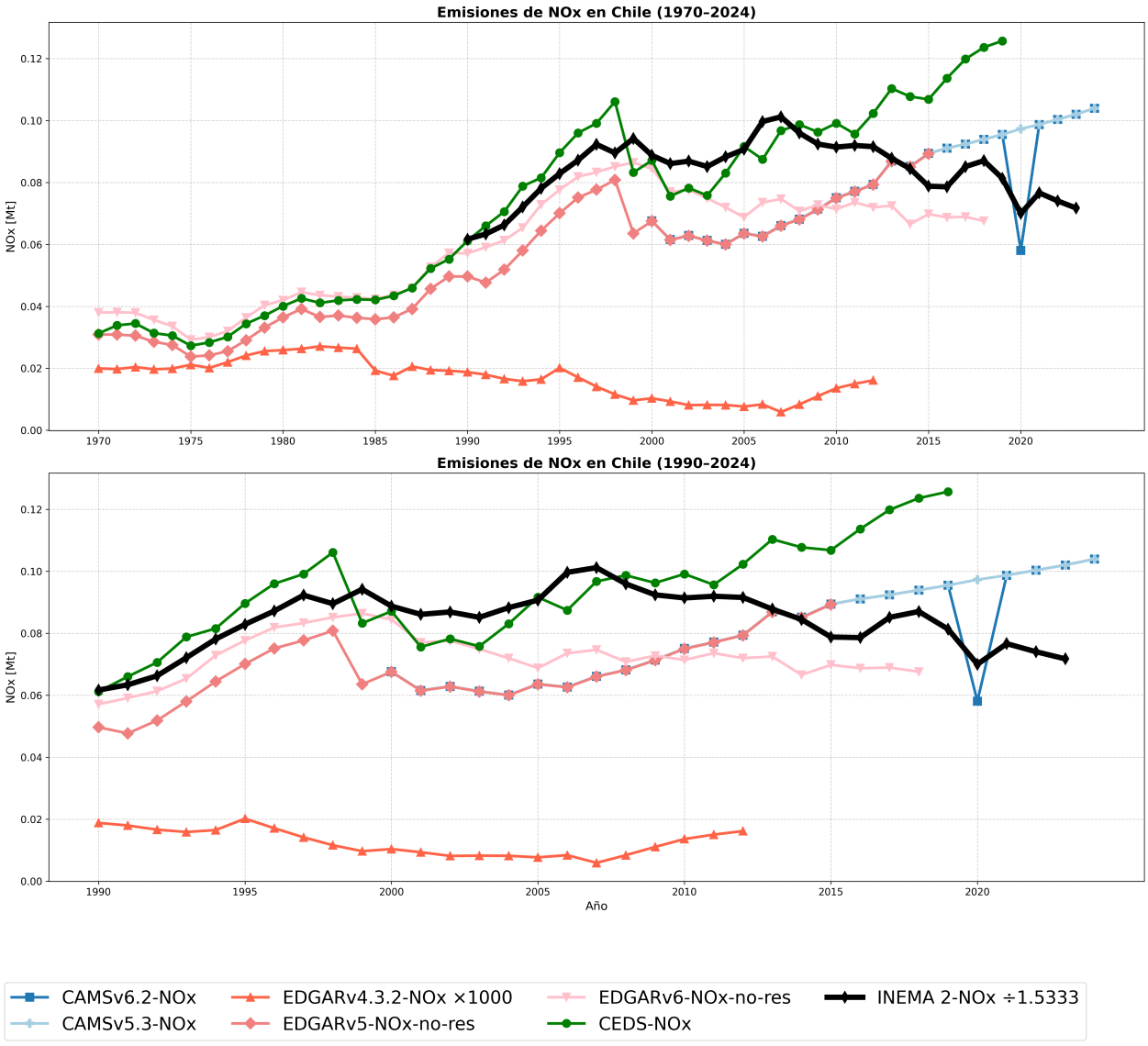


Figura 1.3: Emisiones de NO_x del sector transporte en Chile según inventarios internacionales e inventario nacional INEMA (que se explicará más adelante) [Campos, 2025].

1.2.2. Inventario Nacional de Gases de Efecto Invernadero de Chile

El Inventario Nacional de Gases de Efecto Invernadero (INGEI) es el instrumento oficial del Estado de Chile para contabilizar las emisiones y absorciones de GEI, como parte de sus compromisos ante la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático (CMNUCC). Su elaboración es coordinada por el Ministerio del Medio Ambiente.

El INGEI se actualiza de manera bienal (cada dos años), abarca la serie temporal desde el año 1990 y su última actualización en 2024 detalla las emisiones nacionales de GEI hasta el año 2022. El Ministerio

del Medio Ambiente de Chile Utiliza las metodologías establecidas por el Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático (IPCC) para la estimación de este inventario. Su foco exclusivo son los gases que alteran el balance radiativo de la Tierra: dióxido de carbono (CO_2), metano (CH_4), óxido nitroso (N_2O) y gases fluorados (HFC, PFC, SF6) [Ministerio del Medio Ambiente, 2024a].

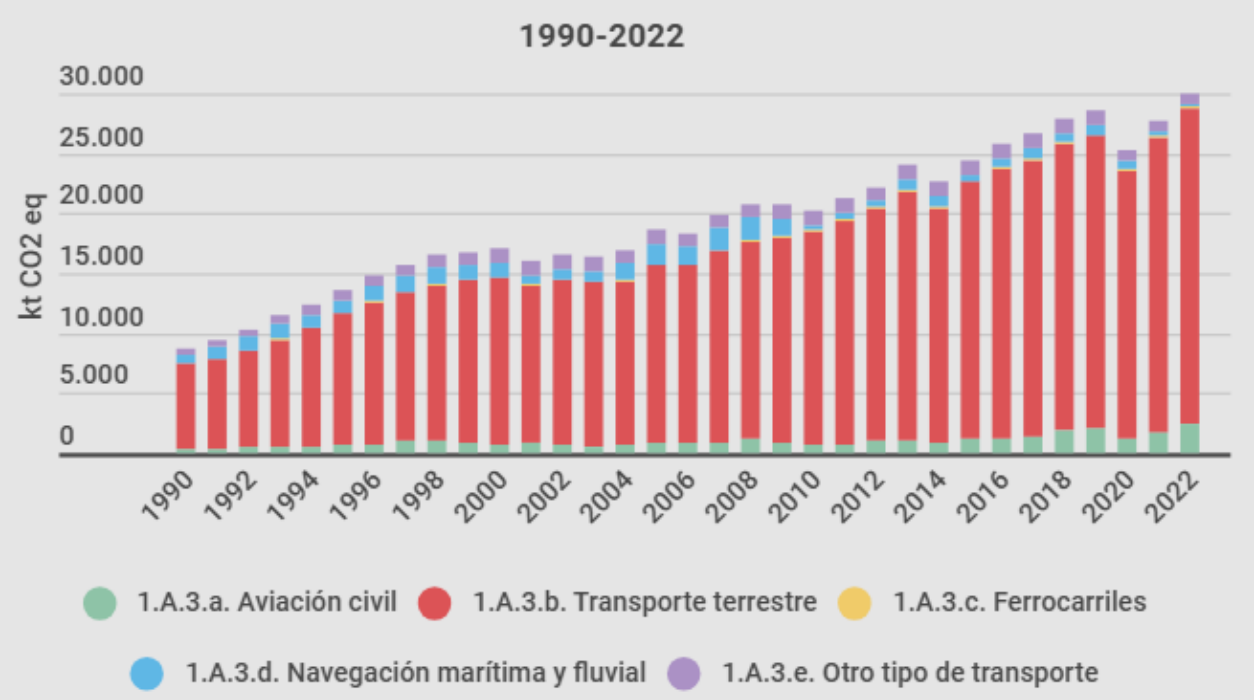


Figura 1.4: Emisiones de gases de efecto invernadero del sector transporte en Chile reportadas por el Inventario Nacional de Gases de Efecto Invernadero [Ministerio del Medio Ambiente, 2024b].

Tal como se puede apreciar en la figura 1.4, históricamente las emisiones de GEI del sector transporte han estado dominadas por el transporte terrestre. El año 2022, sólo el transporte terrestre emitió más del 23% de las emisiones totales de GEI en Chile [Ministerio del Medio Ambiente, 2024b].

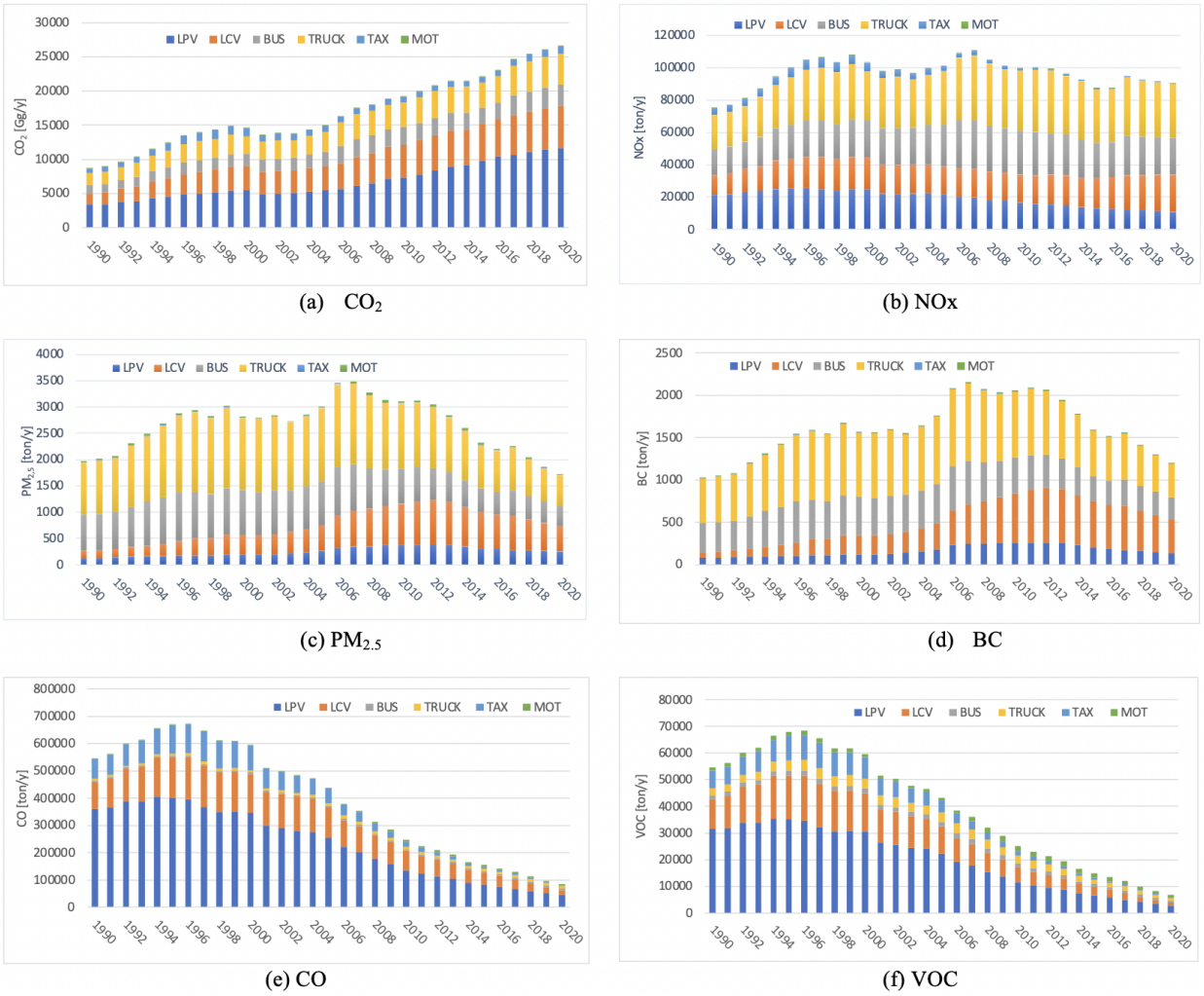
1.2.3. Inventario Nacional de Emisiones Antropogénicas

El año 2021, Álamos publicó el primer Inventario Nacional de Emisiones Antropogénicas de alta resolución para Chile (INEMA) [Álamos et al., 2022]. El conjunto de datos de emisiones del INEMA considera las emisiones de los sectores vehicular, de fuentes puntuales (industriales, energéticas y otros), residencial, de incendios forestales y de quema de residuos agrícolas, agrupadas según codigos del IPCC, estimadas para el período 2015-2020 en su última actualización en 2023 y distribuidas espacialmente en una cuadrícula de alta resolución de 0,01°x0,01° [Alamos et al., 2023].

Para todos los sectores, los contaminantes incluidos son CO_2, NO_x, SO_2, CO, COV, NH_3, MP_{10} y $MP_{2.5}$. Además, se incluyen CH_4, N_2O y carbono negro (BC) para el transporte, los incendios forestales, la quema

de residuos agrícolas y las fuentes residenciales.

En particular, Osses publica el inventario de alta resolución espacial del sector transporte en ruta de INEMA, donde reporta las emisiones de gases de escape en Chile entre los años 1990 y 2020 con una resolución de 0,01° x 0,01° [Osses et al., 2022]. Esta estimación se realiza con bases de datos oficiales disponibles de fuentes como el "Instituto Nacional de Estadística", la Superintendencia de Electricidad y Combustibles (SEC) y Decretos Supremos de los ministerios de Medio Ambiente (MMA) y Transporte y telecomunicaciones (MTT).



(a) CO_2 (b) NOx

(c) $PM_{2.5}$ (d) BC

(e) CO (f) VOC

Figura 1.5: Tendencia de las emisiones totales anuales de gas de escape de NOx según tipo de vehículo en Chile, 1990-2020 [Osses et al., 2022].

Según Osses, sin contar el CO_2, se puede apreciar que el NOx es el que menos se reduce en comparación con el crecimiento económico, con un 20,4% de las emisiones en 2020 en comparación con 1990 [Osses et al., 2022].

Al comparar los resultados con inventarios internacionales (EDGAR, CAMS y CEDS), es posible notar

diferencias notables para los compuestos locales, con estimaciones globales consistentemente más altas. Según Osses, esta discrepancia se debe a los supuestos sobre las tecnologías vehiculares y la calidad del combustible utilizado. INEMA, al utilizar bases de datos actualizadas de entidades oficiales en Chile, mantiene factores de emisión más apegados a la realidad nacional.

En resumen, la revisión de las metodologías de estimación Bottom-Up demuestra que, si bien los inventarios internacionales proporcionan un marco comparativo global, carecen de la representatividad tecnológica y la resolución espacial necesarias para evaluar la compleja dinámica urbana a escala local. En concreto, para el desarrollo de esta investigación, se justifica la adopción del inventario de alta resolución INEMA como el insumo base y perfil -priori para la modelación fotoquímica. Al representar con mayor fidelidad la realidad del parque vehicular y las normativas chilenas, INEMA proporciona el escenario estadístico de emisiones de NO_x más preciso disponible, sirviendo como el punto de referencia indispensable que será contrastado y evaluado frente a las observaciones físicas de la atmósfera mediante el enfoque Top-Down propuesto en este estudio.

1.3. Teledetección

La teledetección, también conocida como percepción remota, constituye la ciencia y tecnología que permite obtener información sobre objetos, áreas o fenómenos sin contacto físico directo [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2025]. Esta disciplina abarca técnicas que van desde la fotografía aérea tradicional hasta complejos sistemas satelitales operados desde el espacio, recolectando datos mediante instrumentos montados en plataformas terrestres, aeronaves o satélites orbitales. Su naturaleza no invasiva facilita el estudio de vastas extensiones geográficas y el acceso a zonas remotas o peligrosas, proporcionando un monitoreo continuo a escala global. Esta capacidad ofrece una perspectiva macroscópica que las mediciones in-situ no pueden igualar en términos de cobertura espacial o resolución temporal, complementando y escalando significativamente las capacidades de observación científica [Asociación Española de Teledetección, 2025].

Esta disciplina se fundamenta en la interacción de la radiación electromagnética (REM) con la superficie terrestre y la atmósfera. La REM, que abarca desde ondas de radio hasta rayos cósmicos, incluye regiones como microondas, infrarrojo, visible y ultravioleta. Diferentes materiales reflejan y absorben las ondas de REM en longitudes de onda específicas, generando una ”firma espectral” única para cada tipo de material, como si se tratase de una huella dactilar [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2025]. Por ejemplo, los pigmentos vegetales absorben luz visible (roja) pero reflejan intensamente infrarrojo cercano, mientras el agua absorbe longitudes largas (verde-rojo) más que las cortas (azul) [Asociación Española de Teledetección, 2025].

Durante el trayecto de la energía electromagnética desde el Sol hasta la Tierra y de regreso al sensor, gases atmosféricos como ozono (UV), dióxido de carbono (13-17,5 µm) y vapor de agua (5,5-7 µm y >27 µm) absorben y dispersan parte significativa de la energía [NASA Applied Remote Sensing Training Program,

2025]. Esta distorsión, aunque desafía el monitoreo superficial, constituye el principio fundamental para el monitoreo de la composición atmosférica y calidad del aire, donde las firmas espectrales de los gases se manifiestan en patrones de absorción/emisión específicos [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2016].

La teledetección se clasifica primariamente según la fuente de energía utilizada para la adquisición de datos. A continuación se describen las dos categorías principales junto con ejemplos de misiones operativas modernas.

Sensores pasivos: La energía radiante natural reflejada o emitida por el sistema Tierra-atmósfera, siendo la radiación solar reflejada la fuente más común [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2025]. Estos instrumentos capturan variables biogeofísicas (como temperatura superficial, color del océano y vigor vegetal) operando principalmente en los rangos visible, infrarrojo cercano y térmico [Asociación Española de Teledetección, 2025].

Ejemplos actuales:

- **Programa Landsat (NASA/USGS)**: La misión Landsat 9, lanzada en 2021, continúa un registro histórico de décadas, fundamental para observar cambios en el uso del suelo.
- **Sentinel-2 (ESA)**: Parte del programa Copernicus, equipada con instrumentos multiespectrales (MSI) de alta resolución para el monitoreo de la vegetación y aguas costeras.
- **MODIS y VIIRS**: Sensores a bordo de satélites como Terra y Aqua, que proveen cobertura global diaria clave para modelos climáticos.

Sensores activos: Generan su propia fuente de energía para iluminar los objetivos, midiendo la energía retrodispersada. Esto les permite operar en condiciones diurnas o nocturnas y penetrar la atmósfera bajo diversas condiciones meteorológicas [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2016]. Destacan dos tecnologías principales:

- **Radar (Radio Detection and Ranging)**: Utiliza ondas de radio (longitudes de 30 cm a 3 mm) para detectar la geometría y rugosidad de objetos a larga distancia, atravesando obstáculos como niebla o nubes [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2025]. La constelación Sentinel-1 emplea Radar de Apertura Sintética (SAR) en banda C, crucial para monitorear deformaciones milimétricas del terreno (interferometría) y derrames de petróleo.
- **LiDAR (Light Detection and Ranging)**: Emplea pulsos láser para medir distancias basándose en el tiempo de retorno, generando nubes de puntos 3D de alta precisión para mapeo topográfico y altimetría [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2025]. Algunos ejemplos son la misión GEDI (Global Ecosystem Dynamics Investigation) en la Estación Espacial Internacional y el satélite ICESat-2, diseñados para medir estructura forestal y elevación de hielos polares respectivamente.

La elección entre sensores pasivos y activos depende estrictamente de las condiciones ambientales (ej. nubosidad constante) y los requerimientos específicos de información, evidenciando la adaptabilidad tecnológica

de la disciplina [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2016].

1.3.1. Observaciones satelitales para calidad del aire

La monitorización del sistema terrestre desde el espacio se ha convertido en una herramienta indispensable para comprender la complejidad de los procesos climáticos y ambientales a escala global. A diferencia de las mediciones in-situ (en terreno), cuya cobertura es limitada, la tecnología satelital ofrece una visión sinóptica, continua y homogénea del planeta, permitiendo la detección precisa de variables críticas como la composición atmosférica, la dinámica oceánica y los cambios en la cobertura terrestre [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2025]. En la actualidad, las agencias espaciales han transitado de misiones puramente científicas hacia infraestructuras operativas robustas que sustentan la toma de decisiones políticas y económicas frente a desafíos globales como el cambio climático. A continuación, se analizan las principales arquitecturas satelitales desarrolladas por la Unión Europea y la NASA, detallando las especificaciones técnicas de sus misiones más relevantes.

El programa de la NASA (EOS/ESO).

El programa de Ciencias de la Tierra de la NASA ha evolucionado desde el Sistema de Observación de la Tierra (EOS) de los años 90, enfocado en grandes plataformas multi-instrumentales como Terra y Aqua, hacia el actual Observatorio del Sistema Terrestre (ESO) [NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2025]. Esta transición responde a la necesidad de comprender la Tierra como un sistema interconectado, integrando datos de la atmósfera, hidrosfera y biosfera. El programa actual se estructura en tres componentes: el segmento de vuelo (satélites), el programa de ciencias aplicadas (toma de decisiones) y el sistema de datos EOSDIS, que gestiona petabytes de información bajo una política de ciencia abierta para maximizar el retorno social [St. Germain, 2025].

El programa Copernicus de la ESA

El programa Copernicus, coordinado por la Agencia Espacial Europea (ESA, por sus siglas en inglés), representa la iniciativa de observación terrestre más ambiciosa a nivel global. Establecido bajo una visión de monitoreo ambiental autónomo, ha evolucionado hacia un ecosistema integrado que gestiona terabytes de datos diarios bajo una política de acceso totalmente gratuita y abierta. Su estructura operativa se fundamenta en tres componentes: el segmento espacial (satélites dedicados), el segmento de servicios (procesamiento de datos para áreas temáticas como atmósfera y cambio climático) y el componente in-situ (sensores terrestres y aéreos) [Agencia Espacial Europea, 2025].

Tabla 1.2: Resumen de las principales misiones de Copernicus y NASA según aplicaciones. [Fernández, 2026]

Aplicación	ESA	NASA
Atmósfera (Global)	**Sentinel-5P (TROPOMI)** • Calidad del aire (NO_2, CH_4) • Res. ultra-alta (7×3.5 km^2)	**Suomi NPP (OMPS/VIIRS)** • Enfoque Meteorológico/Clima • Perfiles verticales y radiación
Superficie Óptica	**Sentinel-2 (MSI)** • 13 bandas (incl. *red-edge*) • Alta revisita: 5 días	**Landsat 9 (OLI-2/TIRS-2)** • 11 bandas (incl. térmicas) • Revisita: 8 días (con L8)
Atmósfera (Geoestacionario)	**Sentinel-4 (UVN)** • Monitoreo horario • Cobertura: **Europa**	**TEMPO** • Monitoreo horario • Cobertura: **Norteamérica**
Océano y Color	**Sentinel-3 (OLCI)** • 21 bandas multiespectrales • Oceanografía física	**PACE (OCI)** • Hiperespectral (UV a NIR) • Biodiversidad (Fitoplancton)
Radar / Agua	**Sentinel-1 (C-SAR)** • Radar de Apertura Sintética • Operativo Día/Noche (Hielo/Suelo)	**SWOT (KaRIn)** • Interferometría Radar • Elevación de agua dulce (Ríos/Lagos)

1.3.2. Instrumento de Monitoreo Troposférico

El Instrumento de Monitoreo Troposférico (TROPOMI) [Veefkind et al., 2012] es la carga útil principal del satélite Sentinel-5 Precursor (S5P) de la ESA, lanzado en octubre de 2017. TROPOMI es un espectrómetro hiperespectral que opera en las bandas ultravioleta (UV), visible (Vis), infrarrojo cercano (NIR) y onda corta (SWIR).

Su misión principal es proporcionar mediciones precisas de gases atmosféricos críticos, incluyendo NO_2, SO_2, CO, CH_4, formaldehído (HCHO), ozono (O_3) y aerosoles. El satélite orbita en una trayectoria heliosincrónica polar a una altitud de 824 km, logrando una cobertura global diaria con un ancho de barrido de 2600 km. El mayor hito tecnológico de TROPOMI es su resolución espacial sin precedentes: fue lanzado con una resolución de 7 km x 3.5 km en el nadir, la cual fue mejorada mediante actualizaciones de software a 5.5 km x 3.5 km a partir de agosto de 2019, permitiendo resolver plumas de contaminación a escala de ciudad e infraestructura interurbana individual [Agencia Espacial Europea, 2026b].



Figura 1.6: Satélite Sentinel-5P [Agencia Espacial Europea, 2026a].

Tabla 1.3: Resumen de las características del satélite Sentinel-5P [Agencia Espacial Europea, 2026b].

Parámetro	**Detalle**
Instrumento	Espectrómetro hiperespectral TROPOMI
Bandas	UV, VIS, NIR, SWIR
Resolución	5,5 x 3,5 km^2 (desde 2019; previamente 7 x 3,5 km^2)
Gases detectados	O_3, NO_2, SO_2, CH_4, CO, Aerosoles
Frecuencia	Cobertura global diaria

1.3.3. Usos de TROPOMI en Chile

El proyecto Spaceborne Observations over Latin America Emission Optimization applications (SOLFEO) de la Agencia Espacial Europea desarrolla algoritmos de inversión avanzados para la estimación de emisiones de amoníaco (NH_3), NOx e hidrocarburos mediante el uso de observaciones satelitales combinadas con una representación de última generación de los procesos relevantes, proporcionando datos cualitativos y cuantitativos sobre emisiones biogénicas y antropogénicas. SOLFEO aprovecha la alta resolución espacial de los datos de OMI (AURA), IASI (METOP) y TROPOMI (Sentinel 5p) para mejorar las estimaciones de emisiones en una región poco estudiada como lo es Latinoamérica. En particular, realiza estimaciones mensuales de las emisiones superficiales medias de NOx en Sudamérica derivadas de las observaciones de

las columnas de NO_2 troposférico de TROPOMI mediante el algoritmo Daily Emissions Constrained by Satellite Observations (DECSO) [van der A et al., 2020].

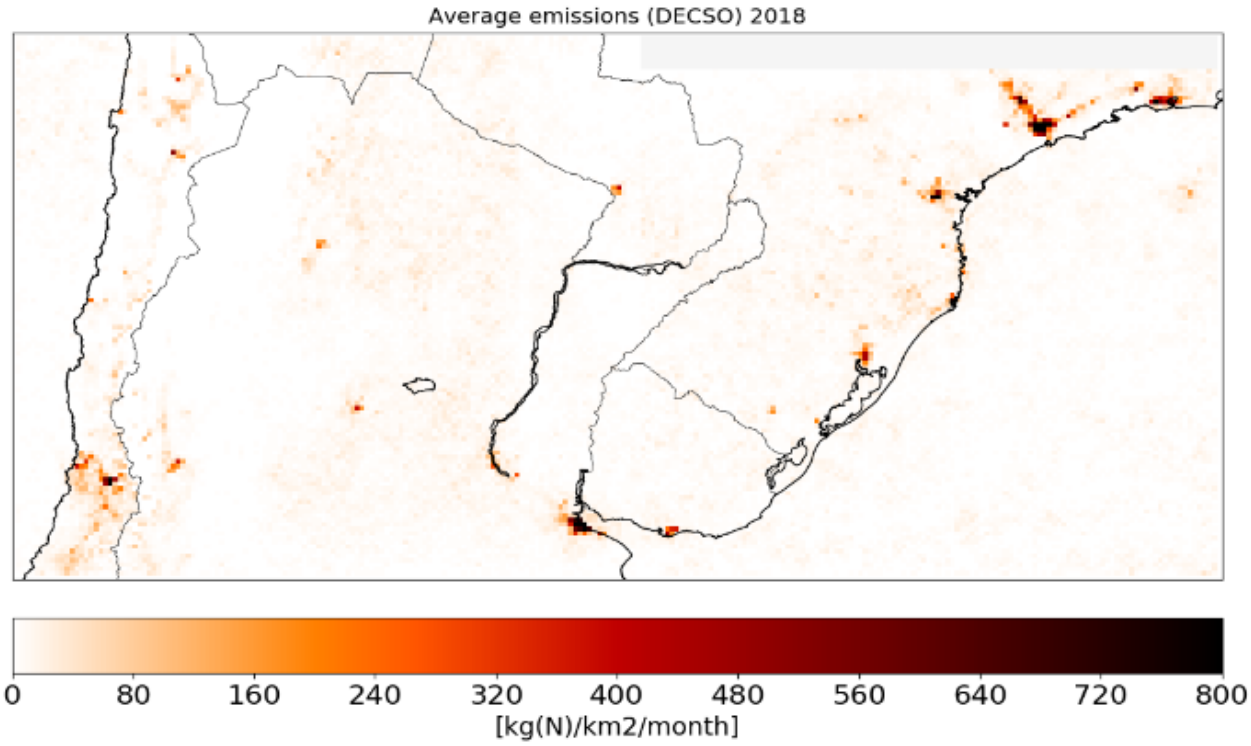


Figura 1.7: Promedio de las emisiones de NOx el año 2019 en Sudamérica derivadas de TROPOMI estimadas mediante el algoritmo DECSO [European Space Agency, 2020].

Por otro lado, Nawaz estima los impactos en salud debido a la exposición de la gente al NO_2 en Santiago de Chile utilizando el modelo Geos-CHEM y datos satelitales de alta resolución espacial para mejorar la precisión. En particular, utiliza las columnas de NO_2 de alta resolución espacial proporcionadas por TROPOMI para mejorar la precisión de las funciones de costo, que son las exposiciones ponderadas por población estimadas por el modelo [Nawaz et al., 2023].

Otra aplicación a destacar en el ámbito nacional es el trabajo de Fernández, quien analizó los datos de NO_2 troposférico y superficial entre 2018 y 2024, comparando las estimaciones satelitales derivadas de TROPOMI con las mediciones terrestres de la red SINCA en las regiones de Antofagasta, Valparaíso, Metropolitana y Biobío [Fernández, 2026]. En la figura 1.8 se observa una sobre estimación de las concentraciones de NO_2 de TROPOMI con respecto a las mediciones en superficie, posiblemente debido a la acumulación de NO_2 en las nubes en invierno, fenómeno que estaría no siendo percibido por los filtros del algoritmo de TROPOMI.

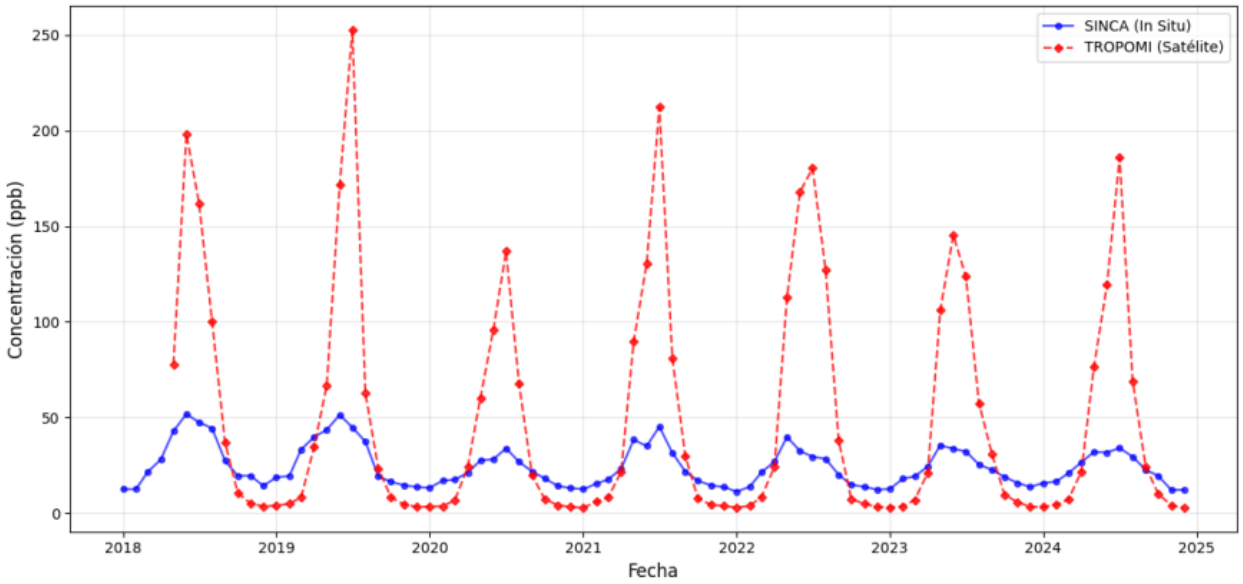


Figura 1.8: Serie temporal de las concentraciones superficiales de NO_2 derivadas de TROPOMI (Rojo) y SINCA (Azul), en la estación Parque O'Higgins, Región Metropolitana [Fernández, 2026].

En síntesis, la revisión de las capacidades de la teledetección y, específicamente, del instrumento TROPOMI, establece a las observaciones espaciales como el pilar empírico ineludible de esta investigación. Si bien la literatura evidencia un uso incipiente de TROPOMI en Chile para la evaluación de impactos en salud y validación de redes de superficie, aún existe un notable vacío en el desarrollo de inventarios de emisiones top-down de alta resolución adaptados a la compleja topografía nacional. En concreto, para el desarrollo de esta tesis, TROPOMI provee la variable observacional crítica: la densidad de columna troposférica de NO_2 con alta resolución espacial y observación continua.

1.4. Métodos para estimar emisiones a partir de observaciones satelitales

Traducir una concentración atmosférica observada desde el espacio en una tasa de emisión en la superficie es un problema matemático inverso complejo. Estos enfoques, conocidos como Top-Down, se clasifican en métodos basados y no basados en Modelos de Transporte Químico (CTM). Los enfoques basados en CTM usan los datos satelitales como restricción para mejorar el inventario de emisiones, incluyendo técnicas como la asimilación de datos variacionales [Yarce Botero et al., 2021], filtros de Kalman [Ding et al., 2017], balances de masa [Cooper et al., 2017] e inversión analítica [Lu et al., 2022]. Por otro lado, los métodos independientes de CTM tienen un enfoque basado en dispersión de pluma [Bovensmann et al., 2010, Hakkarainen et al., 2025] o conservación de masa local aplicando una ecuación de continuidad en estado estacionario [Beirle et al., 2019, Dammers et al., 2024].

1.4.1. Modelos de Transporte Químico en la estimación de emisiones

Los Modelos de Transporte Químico son simuladores numéricos de la atmósfera en 3D que integran emisiones, meteorología y química para predecir concentraciones de contaminantes. Pueden tener cobertura global o local según su objetivo de modelación. A continuación se detallan algunos CTM relevantes:

CHIMERE

- Nombre: CHIMERE Multi-scale Chemistry-Transport Model.
- Organización: Desarrollado conjuntamente por le Instituto Nacional de Entorno Industrial y Riesgos (INERIS) y el Laboratorio de Meteorología Dinámica (LMD/IPSL) en Francia.
- Cobertura: Regional (con capacidad para dominios desde la escala urbana hasta la hemisférica).

LOTOS-EUROS

- Nombre: LOng Term Ozone Simulation - EURopean Operational Smog (LOTOS-EUROS).
- Organización: Desarrollado y mantenido por el consorcio neerlandés formado por TNO (Organización Neerlandesa para la Investigación Científica Aplicada) y KNMI (Real Instituto Meteorológico de los Países Bajos).
- Cobertura: Regional (históricamente centrado en Europa, pero adaptable a otros dominios).

EMEP

- Nombre: EMEP MSC-W (Meteorological Synthesizing Centre-West) Chemical Transport Model.
- Organización: Desarrollado y alojado por el Instituto Meteorológico Noruego (Met Norway) bajo el mandato del programa European Monitoring and Evaluation Programme (EMEP) de las Naciones Unidas.
- Cobertura: Regional (con foco en el dominio europeo) y Global.

GEOS-Chem

- Nombre: Goddard Earth Observing System-Chemistry (GEOS-Chem).
- Organización: Gestionado por un comité directivo internacional con sede en la Universidad de Harvard, con fuerte apoyo de la NASA y múltiples instituciones académicas a nivel global.
- Cobertura: Global, con capacidades de anidamiento (nested grids) para análisis regional de alta resolución sobre áreas específicas.

TM5-MP

- Nombre: Transport Model 5 - Massively Parallel (TM5-MP).
- Organización: Desarrollado por un consorcio de institutos europeos, destacando el KNMI (Países Bajos), la Universidad de Utrecht y el Centro Común de Investigación (JRC) de la Comisión Europea.
- Cobertura: Global, con la característica distintiva de poseer capacidades de "zoom" bidireccional sobre regiones específicas para mayor resolución.
- Es el CTM oficial utilizado por la ESA para proveer los perfiles verticales de gases a priori y calcular los Factores de Masa de Aire (AMF, por sus siglas en inglés) en los algoritmos operativos de recuperación de datos del satélite Sentinel-5P (TROPOMI).

Esta clase de modelos son esenciales en la teledetección por dos razones fundamentales. Primero, se utilizan en los algoritmos de inversión para asimilar las observaciones satelitales. Segundo, y de manera más crítica para el nivel de procesamiento, proveen el perfil vertical a priori necesario para mejorar las observaciones satelitales.

Reemplazar los perfiles globales gruesos por perfiles de alta resolución de un CTM regional como CHIMERE es indispensable para eliminar sesgos en las columnas satelitales sobre áreas urbanas. [Cifuentes et al., 2025]

1.4.2. Enfoque de Divergencia de Flujo

El Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA, por sus siglas en inglés) es una técnica propuesta por Beirle (2019) basado en la ecuación de continuidad de estado estacionario que a partir de las columnas de NO_2 extrae las emisiones de NO_x en superficie (E). Este método utiliza observaciones satelitales de densidades de columna vertical (VCD) de NO_2 y requiere conocimiento de componentes horizontales del viento, un factor de conversión de NO_2 a NO_x y la vida útil química del NO_2 en el momento del paso del satélite [Beirle et al., 2019]. De forma simplificada, el método se enuncia de la siguiente manera:

$$E = \nabla(LVw) + \frac{LV}{\tau} \tag{1.1}$$

Donde w es el campo de viento, V es la densidad de columna del contaminante observada por el satélite, L factor de conversión de NO_2 a NO_x y τ es el tiempo de vida química del gas. Este enfoque ha ganado enorme tracción en la literatura reciente para estimar emisiones de NO_x sin depender de las complejidades y altos costos computacionales de la asimilación variacional de datos. Al acoplar campos de viento de alta resolución temporal con la granularidad de TROPOMI, el método FDA permite aislar emisiones de fuentes lineales, haciéndolo excepcionalmente útil para evaluar el sector transporte.

Por otro lado, si consideramos el término de transporte despreciable y los términos de tiempo de vida y factor de conversión constantes (1.2) (4 horas y 1.32 respectivamente según Beirle) nos queda un modelo de caja

utilizado por Dammers [Dammers et al., 2024].

$$E = \frac{LV}{\tau} = \frac{1.32 \cdot V}{4} \tag{1.2}$$

En conclusión, la revisión de los métodos de estimación espacial define el marco matemático y computacional que sustenta esta investigación. Por un lado, se establece la necesidad crítica de utilizar un Modelo de Transporte Químico regional, específicamente CHIMERE, para reemplazar los perfiles verticales globales por defecto y así corregir los sesgos ópticos en las columnas satelitales urbanas. Por otro lado, la adopción del modelo FDA proporciona la vía analítica óptima para prescindir de la costosa asimilación de datos. En concreto, de esta sección se obtiene la arquitectura metodológica central de la tesis: el modelo CHIMERE no solo actuará como refinador de las observaciones de TROPOMI, sino que suministrará los campos meteorológicos y químicos indispensables (viento w, fracción L y tiempo de vida τ) para resolver la ecuación FDA, permitiendo así cuantificar las emisiones superficiales de NO_x con la precisión necesaria para evaluar el sector transporte.

1.5. Análisis de incertidumbre

La cuantificación de las emisiones a partir de observaciones satelitales requiere una evaluación rigurosa de las incertidumbres inherentes tanto a la recuperación de los datos instrumentales utilizados como a las metodologías de inversión utilizadas. En el caso de las mediciones de NO_2 del instrumento TROPOMI y su uso en el modelo FDA, la literatura reciente ha identificado diferentes fuentes de error que deben ser tratadas explícitamente para asegurar la correcta fiabilidad de las estimaciones.

Las incertidumbres en la recuperación de columnas troposféricas de NO_2 se derivan principalmente de tres procesos secuenciales: el ajuste espectral para obtener la densidad de columna inclinada (SCD), la separación de las contribuciones estratosférica y troposférica, y el cálculo del Factor de Masa de Aire (AMF). Cifuentes demuestra que los sesgos sistemáticos en la partición estratósfera-tropósfera, a menudo vinculados a las limitaciones de los modelos de asimilación globales como el TM5-MP, pueden producir sesgos troposféricos significativos, mientras que los errores en el AMF están altamente dominados por la resolución y precisión de los perfiles verticales a priori utilizados. Segun Cifuentes, el uso de perfiles de alta resolución regional implica una disminución notable de dicha incertidumbre, ya que sus gradientes espaciales son mucho más fidedignos a la hora de representar el entorno próximo a las fuentes urbanas e industriales. [Cifuentes et al., 2026]

Al acoplar estas observaciones con el FDA, las incertidumbres satelitales se propagan y se combinan con los errores asociados a los parámetros físicos y meteorológicos del modelo. Según Rijsdijk, los errores de recuperación satelital tienen componentes aleatorios y componentes que están correlacionados espacialmente. Para aplicaciones de asimilación o evaluación de modelos, es fundamental tratar el "error de representación espacial", el cual surge cuando hay gran variabilidad sub-cuadrícula, para lo cual proponen el uso de

"superobservaciones" que promedian los píxeles satelitales mitigando los sesgos asociados a la nubosidad y reduciendo el ruido. [Rijsdijk et al., 2025]

Por otro lado, la precisión del método FDA es altamente dependiente de la información química a escala fina. Cifuentes evaluó el FDA a partir de observaciones sintéticas y determinó que el uso de perfiles fijos (escalares) para la vida útil del NO_2 o del campo de vientos introduce sesgos considerables, por lo que es necesario utilizar resoluciones espaciotemporales altas. Además, demostraron que el método sobreestima de forma sistemática las emisiones cuando se utilizan columnas troposféricas totales, sin embargo, restringir la observación estrictamente a las columnas de la Capa Límite Planetaria (PBL) corrige en gran medida este error, ya que el balance local entre emisiones y sumideros ocurre en la capa límite, desacoplada de la tropósfera libre. [Cifuentes et al., 2025]

El adecuado tratamiento de la incertidumbre valida el método y confiere solidez estadística a las comparaciones con bases de datos Bottom-Up. Por ejemplo, en el trabajo de Patel, en su evaluación global sobre extracciones de petróleo y gas, apoyaron sus estimaciones con un análisis de error (con incertidumbres entre el 32% y el 54%) para evidenciar que las grandes discrepancias observadas correspondían a deficiencias estructurales de los inventarios oficiales y no a meros errores instrumentales [Patel et al., 2026]. Otra muestra de todo esto es la presentada por Rey-Pommier en el estudio de emisiones en Chipre, donde concluyó que la estimación usando FDA está fuertemente limitada por la relación señal-ruido en la densidad de columna y por las resoluciones del viento y los radicales hidroxilo (OH), lo cual ocasiona grandes discrepancias al querer evaluar emisiones de plantas puntuales individuales. [Rey-Pommier et al., 2025]

En conclusión, atendiendo a los muchos retos que tienen la metodología y las fuentes de error que recoge la literatura más reciente, el presente trabajo realizará el tratamiento de la incertidumbre a partir de dos caminos complementarios. Por una parte, se llevará a cabo un análisis de propagación de los errores de los inputs del FDA, en el que se determinará matemáticamente de qué forma las incertidumbres individuales que subyacen en el campo de viento (w), en el tiempo de vida química (τ), en la relación de partición (L) y en la propia observación de columnas de NO_2 determinan la cuantificación final de la tasa de emisión. Por otra parte, se plantea realizar un análisis de variabilidad, en el que se pondrá de manifiesto la dispersión espaciotemporal de las concentraciones estimadas a partir de celdas de interés fuertemente asociadas a la actividad antropogénica como pueden ser las fuentes puntuales de gran escala o la infraestructura de transporte muy utilizada (ej. carreteras principales y zonas urbanas de alto flujo vehicular). Dicha doble aproximación nos permitirá acotar el alcance del error teórico, y al mismo tiempo caracterizará la sensibilidad y el nivel de confianza del método acerca de la complejidad y heterogeneidad del entorno urbano.

1.6. Síntesis

Este marco teórico establece los cimientos conceptuales, físicos y matemáticos que estructuran la presente investigación, delineando un camino lógico desde la comprensión del contaminante hasta su cuantificación

empírica mediante plataformas espaciales.

En primer lugar, el análisis de la dinámica atmosférica revela que el dióxido de nitrógeno (NO_2) opera como un trazador geoespacial ideal. Dada su alta reactividad y corta vida media fotoquímica, sus concentraciones se mantienen espacialmente acopladas a sus fuentes de origen. Esto lo convierte en el indicador óptimo para monitorear las emisiones antropogénicas.

Para cuantificar estas emisiones, la gestión ambiental ha dependido históricamente de metodologías Bottom-Up. Tal como se analizó, el inventario nacional de alta resolución INEMA constituye la estimación teórica más robusta y fidedigna para Chile, superando ampliamente a los repositorios globales. No obstante, al sustentarse intrínsecamente en aproximaciones estadísticas y factores de actividad, este inventario requiere un validación empírica independiente para evaluar su representatividad real.

Es en este punto donde la teledetección satelital, materializada en el instrumento TROPOMI, emerge como la solución observacional. Su capacidad para proveer densidades de columna troposférica de NO_2 con una resolución espacial sin precedentes otorga el insumo de datos Top-Down necesario para observar la manifestación física de la contaminación a escala urbana e interurbana.

Por su parte, el modelo de transporte químico a escala regional CHIMERE cumple un rol dual insustituible: aporta los perfiles a-priori locales para corregir los sesgos ópticos del satélite (en el cálculo del AMF) y suministra los campos de viento (w), el factor de conversión (L) y el tiempo de vida química (τ). Al integrar estos parámetros en el Enfoque de Divergencia de Flujo, se obtiene la herramienta analítica definitiva para traducir las densidades de columna en estimaciones de emisiones superficiales de NO_x.

Sin embargo, la articulación de estas avanzadas herramientas conlleva una serie de desafíos insoslayables en el marco de la propagación del error. Tal y como evidenció la revisión literaria, la precisión de las estimaciones es altamente sensible a las incertidumbres en la recuperación satelital y a la variabilidad espacial de los parámetros meteorológicos y químicos. Por ende, resulta fundamental la incorporación de un análisis riguroso de incertidumbre, estructurado mediante la propagación analítica de errores en los inputs del FDA y la evaluación empírica de la variabilidad a nivel de píxel en zonas críticas. Este análisis es el mecanismo que confiere solidez estadística a los resultados, permitiendo discernir si las discrepancias frente a los inventarios Bottom-Up obedecen a sesgos metodológicos o a deficiencias estructurales de los reportes oficiales.

En conclusión, la fotoquímica del NO_x, el inventario Bottom-Up INEMA, las observaciones satelitales de TROPOMI, el modelo de inversión FDA sustentado por CHIMERE y la evaluación analítica de sus incertidumbres conforman la arquitectura metodológica integral de esta tesis. A continuación, se presentarán las bases de datos y la metodología detallada utilizadas en el desarrollo de la investigación.

Capítulo 2

Datos y Metodología

Este capítulo describe la metodología implementada para cuantificar las emisiones superficiales de óxidos de nitrógeno (NO_x) en Chile central mediante un enfoque Top-Down. Inicialmente, se detallan las fuentes de información y el preprocesamiento necesario para acoplar las observaciones satelitales de TROPOMI con las simulaciones del modelo regional WRF-CHIMERE. Luego, se explica la estimación de emisiones mediante dos vías: una aproximación preliminar a través de un modelo de caja y una evaluación de alta resolución aplicando el Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA). Finalmente, se describen los análisis de incertidumbre y la comparación directa de los resultados con el inventario oficial INEMA (Bottom-Up).

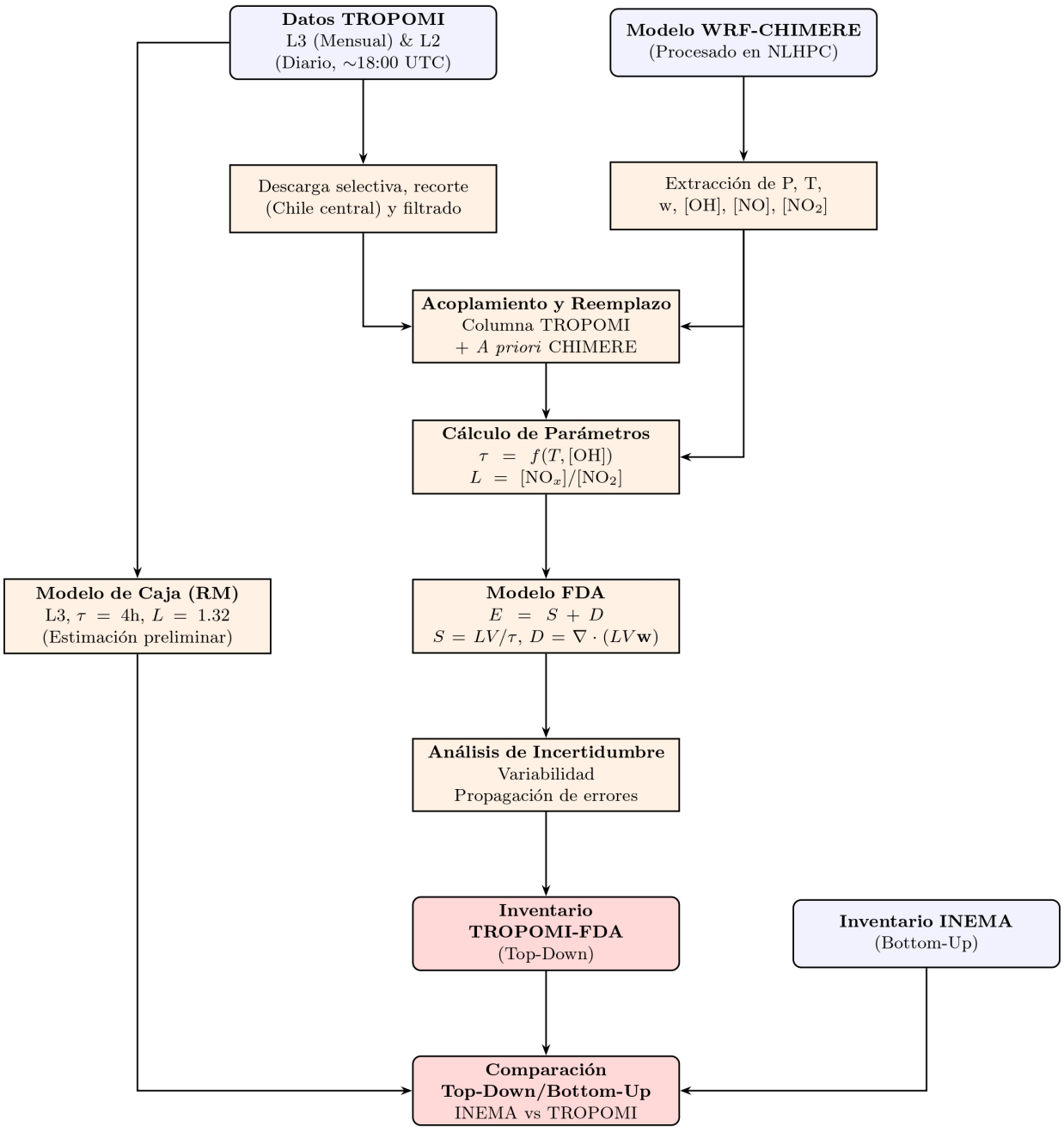


Figura 2.1: Diagrama de flujo de la metodología utilizada para la estimación de emisiones de NO_x. La leyenda de colores es la siguiente: las fuentes de datos externos se indican en azul, los procesos y cálculos matemáticos en amarillo, y los resultados o inventarios finales en rojo.

2.1. Fuentes de datos

La estimación de emisiones mediante el modelo de Divergencia de Flujo (FDA) requiere acoplar mediciones físicas directas con modelamiento numérico. Por ello, la metodología de esta investigación se estructura sobre tres fuentes de datos complementarias: observaciones satelitales de alta resolución (TROPOMI) para cuantificar la distribución espacial del contaminante, simulaciones meteorológicas y de transporte químico (WRF-CHIMERE) para determinar la cinemática y el decaimiento local, y el Inventario Nacional de Emisiones Antropogénicas (INEMA) como línea base para la validación de los resultados. A continuación, se detallan las especificaciones técnicas de cada uno de estos insumos.

2.1.1. Observaciones satelitales

Se utilizan los productos de nivel 2 (L2) y nivel 3 (L3) del instrumento TROPOMI, a bordo del satélite Sentinel-5P de la Agencia Espacial Europea (ESA). El instrumento ofrece una resolución espacial sin precedentes (5.5×3.5 km), ideal para la detección de gradientes urbanos. Los datos L3, que corresponden a promedios temporales interpolados en una grilla regular, se emplean para la evaluación preliminar con el modelo de caja. Por otro lado, los datos L2, que conservan la geometría de observación original (swath) de las órbitas diarias, constituyen el insumo principal para la implementación del modelo FDA de alta resolución, evitando la pérdida de información por promedios espaciales previos.

2.1.2. Datos meteorológicos y simulaciones de CTM

La caracterización de la dinámica atmosférica y la composición química de fondo se fundamenta en el acoplamiento de los modelos WRF (Weather Research and Forecasting) y CHIMERE. A partir de las simulaciones de WRF, se extraen las variables meteorológicas fundamentales: los campos de viento horizontal (u, v), los niveles de presión y el perfil de temperatura. En paralelo, se emplean corridas del modelo de transporte químico CHIMERE, procesadas en el National Laboratory for High Performance Computing (NLHPC), de las cuales se obtienen las concentraciones de especies traza clave para la química de los óxidos de nitrógeno. Específicamente, se cuenta con las simulaciones horarias de todo el año 2019, de las que se extraen los campos de concentración del radical hidroxilo (OH), monóxido de nitrógeno (NO) y dióxido de nitrógeno (NO_2). Este conjunto de datos WRF-CHIMERE fue generado en el marco del proyecto FONDECYT N°1181139 y de ahora en adelante se citarán como N. Huneeus, comunicación personal.

2.1.3. Inventario Nacional de Emisiones Antropogénicas

Para contrastar y validar los resultados observacionales (enfoque Top-Down), se emplea el Inventario Nacional de Emisiones Antropogénicas (INEMA) [Álamos et al., 2022], basado en un enfoque estadístico tradicional (Bottom-Up). Se realiza una recopilación y filtrado de las emisiones de óxidos de nitrógeno (NO_x) reportadas por este inventario para el mismo periodo temporal y dominio espacial de la investigación, permitiendo una intercomparación directa de las magnitudes y la distribución espacial de las fuentes.

2.2. Área y periodo de estudio

Esta sección establece los límites geográficos y cronológicos adoptados para la cuantificación de las emisiones de NO_x. La delimitación del dominio espacial responde a la necesidad de evaluar una zona de alta complejidad topográfica y fuerte densidad antropogénica como Chile Central, aislando nodos urbanos e industriales clave para el análisis de variabilidad. Por su parte, la definición del dominio temporal (2018–2025) se ajusta rigurosamente a las ventanas de disponibilidad operativa, las capacidades de acoplamiento numérico y las restricciones algorítmicas tanto de las observaciones de TROPOMI como de las simulaciones de WRF-CHIMERE. A continuación, se detallan las características y justificaciones técnicas de ambos límites estructurales.

2.2.1. Delimitación del dominio espacial

El dominio principal de esta investigación se circunscribe a la zona denominada como Chile central, una región caracterizada por una topografía compleja y una alta densidad de actividades urbanas, logísticas e industriales. Específicamente, el área de estudio se define mediante un dominio rectangular comprendido entre los 31.8°S y 35.2°S de latitud, y entre los 69.6°O y 72.7°O de longitud.

Este espacio geográfico abarca centros urbanos de alta densidad, destacando la Región Metropolitana de Santiago y nodos logístico-industriales costeros como el Gran Valparaíso. La interacción entre la Depresión Intermedia, la Cordillera de la Costa y la Cordillera de los Andes impone barreras físicas severas al transporte horizontal de masas de aire, propiciando condiciones complejas para la dispersión y acumulación de contaminantes atmosféricos.

Además, se abarcan ciudades cercanas como Rancagua y Curicó que conectan con Santiago mediante la carretera panamericana (también llamada Ruta 5) que actúa como eje del transporte terrestre en el Valle Central, representando una de las fuentes lineales de emisión de óxidos de nitrógeno (NO_x) más críticas y persistentes dentro del sistema atmosférico bajo estudio.

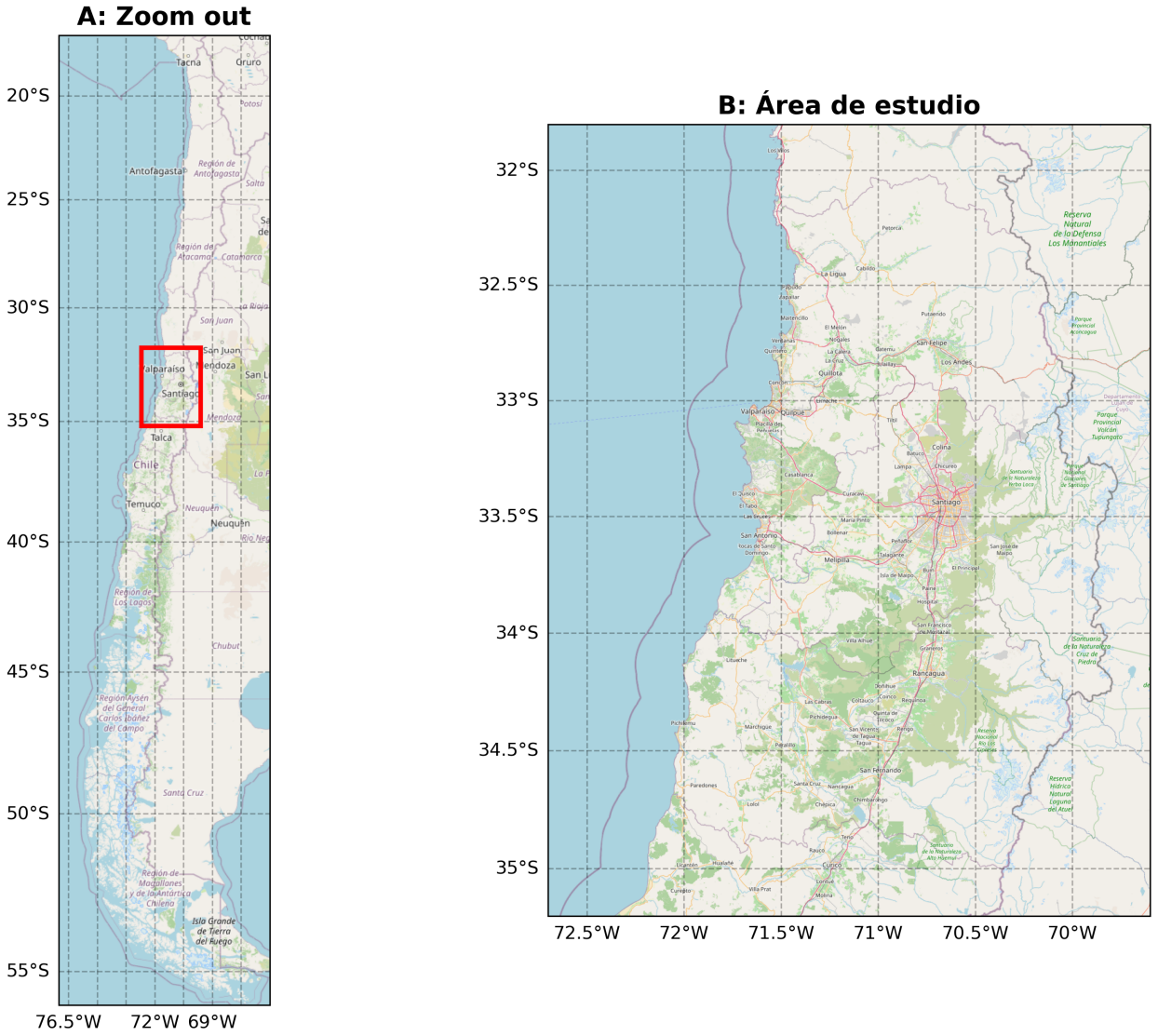


Figura 2.2: Mapa del área de estudio denominada "Chile Central".

Con el fin de capturar la heterogeneidad de las fuentes de emisión y evaluar el desempeño del modelo en distintos regímenes, se seleccionan puntos de control específicos para el análisis de variabilidad temporal e incertidumbre:

- **Centro Santiago** (33.448°S, 70.669°O): Un nodo de alto flujo vehicular y densidad urbana en el centro de Santiago.
- **Puerto Valparaíso** (33.036°S, 71.626°O): Un nodo logístico-industrial en el puerto de Valparaíso.
- **Control** (33.280°S, 71.180°O): Un punto de control de fondo ubicado en un sector sin fuentes antropogénicas significativas, utilizado para cuantificar el ruido instrumental y metodológico.

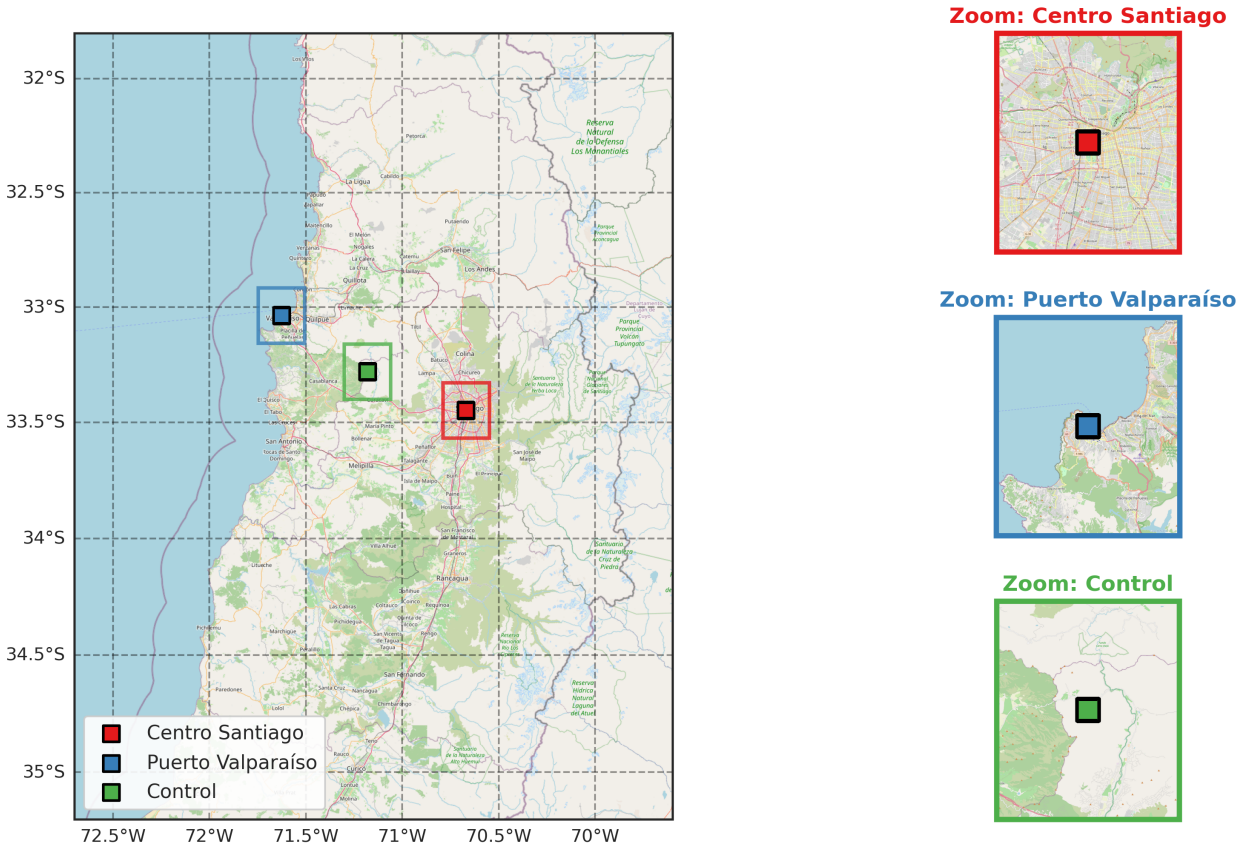


Figura 2.3: Mapa de la ubicación de los puntos de interés para el análisis de variabilidad que se detallará más adelante en este capítulo.

2.2.2. Definición del dominio temporal

El análisis temporal de esta investigación comprende el periodo entre los años 2018 y 2025. Debido a la disponibilidad diferencial de las observaciones satelitales y de las simulaciones del modelo de transporte químico, se han establecido consideraciones específicas para distintos bloques temporales, los cuales se esquematizan en la figura 2.4:

- **2018 (Análisis parcial):** Constituye el primer año de evaluación. Dado que el satélite Sentinel-5P comenzó a registrar datos operativos de forma regular a partir del 1 de mayo de 2018, el análisis para este año abarca únicamente desde dicha fecha hasta el término del periodo anual.
- **2019 (Año base de análisis detallado):** Este año representa el núcleo del acoplamiento metodológico. Al contar con disponibilidad completa y simultánea tanto de las observaciones de TROPOMI como de las simulaciones meteorológicas y químicas de WRF-CHIMERE, 2019 se define como el año base para la evaluación íntegra del Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA).
- **2020, 2021, 2022 y 2025 (Análisis extendido):** Para estos años se realiza el análisis completo de las

densidades de columna. No obstante, se emplean los perfiles verticales y campos meteorológicos de WRF-CHIMERE correspondientes al año 2019.

- **2023 y 2024 (Periodo con consideraciones algorítmicas):** Al igual que en el bloque anterior, se utilizan los datos del modelo WRF-CHIMERE correspondientes a 2019. Adicionalmente, el Real Instituto Meteorológico de los Países Bajos (KNMI) reportó una anomalía en el algoritmo de nubes FRESCO (versión 2.6.0), el cual afecta la precisión de las recuperaciones de NO_2 entre el 26 de noviembre de 2023 y el 8 de septiembre de 2024. Por consiguiente, los datos satelitales extraídos en esta ventana temporal son tratados con especial precaución durante la interpretación de los resultados [KNMI, 2026].

La decisión metodológica de utilizar los campos escalares y vectoriales de la simulación WRF-CHIMERE del año 2019 para evaluar el resto de la serie temporal responde a la disponibilidad computacional de las corridas del modelo en el dominio de estudio. Las implicancias, limitaciones y la validez termodinámica de mantener esta climatología y fotoquímica constante para la evaluación interanual de emisiones serán discutidas en profundidad en el Capítulo 3 de Distribución espacio-temporal de las emisiones de NO_x en Chile.

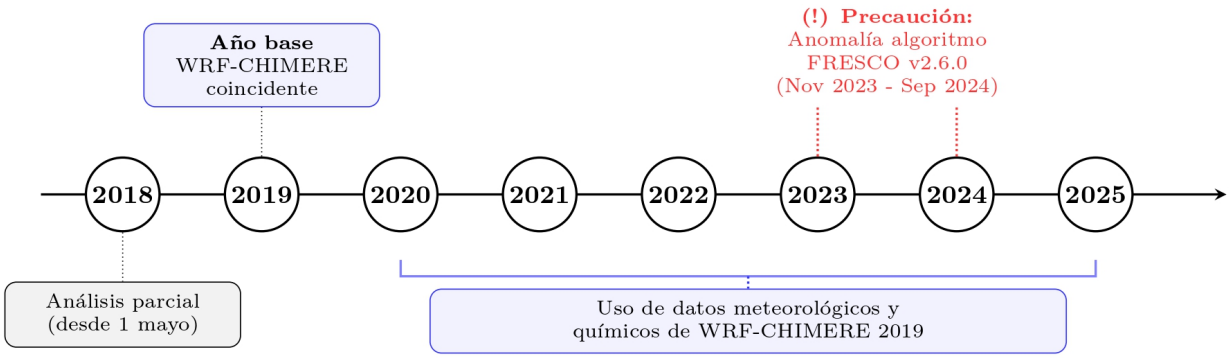


Figura 2.4: Línea de tiempo del periodo de estudio, indicando la disponibilidad de datos satelitales y las restricciones asociadas al acoplamiento con el modelo de transporte químico.

El análisis se realiza con una resolución temporal diaria, sincronizada con el horario de sobrepaso del satélite Sentinel-5P sobre la región de estudio (aproximadamente a las 18:00 UTC, equivalente a las 14:00 hora local). A partir de estas estimaciones instantáneas, los resultados se integran temporalmente para reportar promedios mensuales y estimaciones agregadas anuales, permitiendo capturar tanto el ciclo diurno-semanal como la estacionalidad de las emisiones.

2.3. Preprocesamiento de datos

Previo a la aplicación del modelo de Divergencia de Flujo (FDA), es estrictamente necesario compatibilizar las observaciones satelitales y las simulaciones numéricas para asegurar la consistencia física del acoplamiento.

Por ello, esta sección detalla los tres procedimientos técnicos implementados: la homogeneización espacial bidimensional entre la geometría orbital de TROPOMI y la grilla regular de WRF-CHIMERE; la corrección del Factor de Masa de Aire (AMF) del satélite mediante el reemplazo de su perfil vertical *a priori* por simulaciones regionales de alta resolución; y la extracción de las variables termodinámicas y fotoquímicas representativas dentro de la Capa Límite Planetaria (PBL).

2.3.1. Homogeneización de la resolución espacial

Debido al volumen de información satelital, se implementa un algoritmo de filtrado dinámico para los datos L2 de TROPOMI, el cual recorta exclusivamente los píxeles correspondientes al dominio de Chile central, descartando el resto de la órbita. Para asegurar la conservación de masa en el acoplamiento, los datos de los modelos (WRF-CHIMERE) son reproyectados hacia la grilla variable del satélite utilizando interpolación bilineal para campos meteorológicos continuos. Para la presentación de promedios mensuales finales, las estimaciones diarias se proyectan a la resolución de la grilla estática de CHIMERE mediante el método del vecino más cercano en 2D.

2.3.2. Reemplazo del perfil a priori de TROPOMI

La recuperación estándar de la Densidad de Columna Vertical (VCD, por sus siglas en inglés) troposférica de NO_2 de TROPOMI utiliza perfiles verticales de concentración obtenidos del modelo de transporte químico global TM5-MP a una resolución espacial gruesa de aproximadamente $1^\circ \times 1^\circ$. Debido a esta baja resolución horizontal, el perfil *a priori* de TM5 no logra representar adecuadamente la variabilidad espacial fina de las emisiones antropogénicas ni la estructura térmica basal caracterizada por inversiones térmicas frecuentes en la cuenca de Chile Central.

La sustitución del perfil vertical *a priori* original por defecto (basado en el modelo global TM5-MP) por perfiles de mayor resolución espacial obtenidos de modelos regionales, es una práctica metodológica expresamente recomendada por el manual de usuario del producto de Nivel 2 de TROPOMI para el dióxido de nitrógeno [Copernicus Sentinel-5P (processed by ESA), 2021]. Con el objetivo de acoplar la química atmosférica de alta resolución simulada por CHIMERE a la óptica del satélite, se implementó un algoritmo computacional de base espacio-temporal operando a nivel de píxel individual.

El procedimiento numérico inicia con la extracción geométrica y el control de calidad de los datos satelitales L2. Se aísla la columna troposférica original de NO_2, descartando aquellas observaciones con un índice de calidad (qa_value) inferior a 0.75 para minimizar la perturbación por nubosidad o anomalías instrumentales. Simultáneamente, se extraen los vértices geográficos exactos de cada celda (*longitude_bounds* y *latitude_bounds*) desde el grupo de soporte de geolocalización, información indispensable para reconstruir la topología curvilínea del barrido satelital. Dado el carácter dinámico del sobrevuelo, se evalúa el momento exacto de impacto (t_{in}) sobre el dominio de Chile Central identificando las líneas de escaneo de entrada y salida ($minscanline$ y $maxscanline$). Este marcador temporal permite interrogar y extraer el estado atmosférico

simulado por CHIMERE en el instante cronológico más próximo a la órbita.

Una vez sincronizados espacial y temporalmente, los campos tridimensionales del modelo regional se proyectan sobre la matriz de píxeles de TROPOMI mediante la librería `xESMF`. Para la concentración tridimensional de NO_2 (expresada en fracción molar), se aplica un esquema de regrillado conservativo, garantizando así la preservación rigurosa de la masa de contaminante durante la interpolación geométrica. Por el contrario, para las variables físicas continuas, como la altitud y la presión hidrostática superficial, la transferencia de resolución se efectúa mediante interpolación bilineal.

A continuación, se procede a reconstruir la estructura vertical termodinámica. Se calculan las presiones hidrostáticas en los centros (*full-levels*, p_{fl}) e interfaces (*half-levels*, p_{hl}) de cada capa del modelo CHIMERE, al mismo tiempo que se recrea la grilla tridimensional de presiones subyacente de TM5 utilizando los coeficientes híbridos a_k, b_k y la presión de superficie. Además, se realiza la recuperación del *Averaging Kernel* troposférico (AK_{trop}), el cual define la sensibilidad altitudinal del sensor. A partir de los parámetros disponibles en el producto L2, el Kernel troposférico se aísla escalando el Kernel total de la columna (A) por la relación entre el factor de masa de aire total (AMF_{total}) y el troposférico (AMF_{trop}):

$$AK_{\text{trop}} = AK \cdot \frac{AMF_{\text{total}}}{AMF_{\text{trop}}} \tag{2.1}$$

Seguidamente, para cada coordenada bidimensional de la matriz, estos perfiles de sensibilidad óptica se interpolan linealmente desde la estructura de presión de TM5 hacia los niveles hidrostáticos exactos de CHIMERE ($AK_{\text{CHIM},\,k}$), forzando a cero cualquier sensibilidad por encima de la tropopausa.

El recálculo final de la columna se concreta integrando verticalmente el perfil espacial numéricamente acoplado. La conversión dimensional desde la fracción molar ($x_{\text{NO}_2,k}$) hacia la densidad de columna por capa (Pmolec/cm^2) requiere evaluar la diferencia de presión hidrostática entre las interfaces adyacentes ($\Delta p_k = p_{\text{hl},k} - p_{\text{hl},k+1}$). Bajo este esquema, se simulan dos densidades de columna teóricas. La primera corresponde a la columna troposférica pura simulada por el modelo regional:

$$VCD_{\text{CHIM, sim}} = C \sum_{k=1}^{N_{\text{lev}}} \Delta p_k \cdot x_{\text{NO}_2,k} \tag{2.2}$$

La segunda densidad representa la columna filtrada simulando la visión óptica del satélite, para lo cual se integra el Kernel troposférico ajustado:

$$VCD_{\text{CHIM, AK}} = C \sum_{k=1}^{N_{\text{lev}}} \Delta p_k \cdot x_{\text{NO}_2,k} \cdot AK_{\text{CHIM},\,k} \tag{2.3}$$

donde $C = \frac{10^{-15} \cdot 0.1 \cdot N_{\text{Av}}}{g \cdot M_{\text{aire}}}$ agrupa las constantes físicas de conversión (N_{Av} como número de Avogadro, g

como aceleración de gravedad y M_{aire} como masa molar del aire seco). Finalmente, para materializar la sustitución física del perfil, se establece un factor de corrección proporcional ($\mathcal{R}_{\text{CHIM}}$) definido por la razón de ambas columnas. Al multiplicar este factor directamente por la observación satelital original operativa ($VCD_{\text{TROPOMI, TM5}}$), se obtiene la nueva densidad de columna vertical acoplada al perfil a priori de CHIMERE:

$$\mathcal{R}_{\text{CHIM}} = \frac{VCD_{\text{CHIM, sim}}}{VCD_{\text{CHIM, AK}}} \tag{2.4}$$

$$VCD_{\text{TROPOMI, CHIM}} = VCD_{\text{TROPOMI, TM5}} \cdot \mathcal{R}_{\text{CHIM}} \tag{2.5}$$

2.3.3. La Capa Límite Planetaria (PBL)

Los campos escalares y vectoriales provenientes de WRF-CHIMERE (viento, temperatura, presión y concentraciones de OH) se integran y promedian verticalmente dentro de la Capa Límite Planetaria (PBL, por sus siglas en inglés). Esta consideración física se sustenta en el hecho de que los contaminantes primarios de vida corta, como los NO_x, se encuentran bien mezclados dentro de esta capa debido a la turbulencia térmica y mecánica durante las horas de máxima insolación (coincidente con el horario de sobrepaso del satélite a las 14:00 hora local). De este modo, los parámetros extraídos representan adecuadamente la columna de aire donde ocurre el transporte efectivo y el decaimiento fotoquímico de las emisiones superficiales [Cifuentes et al., 2025].

2.4. Implementación del Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA)

La presente sección describe el marco analítico y computacional empleado para la estimación Top-Down de emisiones de óxidos de nitrógeno (NO_x) mediante el Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA). Se detalla la parametrización dinámica del tiempo de vida químico (τ) y el factor de partición (L), el tratamiento geométrico requerido para acoplar y rotar los campos de viento hacia la grilla nativa (swath) de TROPOMI, y las transformaciones dimensionales aplicadas. En su conjunto, esta secuencia de geoprocesamiento y modelación matemática permite traducir las densidades de columna observadas desde el espacio en tasas de emisión superficiales estandarizadas y directamente comparables con los inventarios oficiales.

2.4.1. Estimación preliminar mediante Modelo de Caja

Como línea base comparativa, se realiza una aproximación inicial de las emisiones de NO_x utilizando datos L3, correspondientes a promedios mensuales para todo el período de estudio. Este modelo asume condiciones estacionarias y viento despreciable a gran escala, limitando la emisión (E) al término de decaimiento químico ($S = LV/\tau$), parametrizado con escalares fijos de tiempo de vida ($\tau = 4$ h) y partición

($NO_x/NO_2 \approx 1.32$) [Beirle et al., 2019]. Los valores L3 de columna vertical de NO_2 de TROPOMI son extraídos de la base de datos Thematic Emission Monitoring Integrated Services (TEMIS). [TEMIS, 2026]

2.4.2. Ecuación de Conservación de masa espacial

Para el modelamiento de alta resolución celda a celda, se aplica la ecuación de continuidad atmosférica para una columna vertical:

$$\frac{\partial(LV)}{\partial t} = E - S - D \tag{2.6}$$

Asumiendo estado estacionario y resolviendo para E:

$$E = S + D \tag{2.7}$$

Donde las emisiones totales (E) se explican por la suma del término sumidero químico (S) y el término de divergencia del transporte horizontal (D):

$$S = \frac{L \cdot V}{\tau} \tag{2.8}$$

$$D = \nabla \cdot (L \cdot V \cdot \mathbf{w}) \tag{2.9}$$

Donde V es la columna de NO_2 corregida ($VCD_{TROPOMI,nuevo}$), L es la relación NO_x/NO_2, τ es el tiempo de vida del gas, y $\mathbf{w}$ es el vector del campo de viento horizontal (u, v).

Por lo tanto, el modelo FDA utilizado se describe matemáticamente por la siguiente ecuación:

$$E = \frac{L \cdot V}{\tau} + \nabla \cdot (L \cdot V \cdot \mathbf{w}) \tag{2.10}$$

2.4.3. Discretización espacial y cálculo de la divergencia

Para interpretar físicamente el modelo, resulta fundamental distinguir entre la definición matemática del operador de divergencia y su implicancia meteorológica dentro de la ecuación de conservación. Matemáticamente, la divergencia ($\nabla \cdot \mathbf{F}$) cuantifica el flujo neto de un campo vectorial que entra o sale de un volumen de control infinitesimal. En la meteorología sinóptica tradicional, la divergencia de un campo de viento superficial se asocia a movimientos verticales de compensación, como la subsidencia o la convección. Sin embargo, en el contexto del modelo FDA aplicado a columnas satelitales, este término asume un significado advectivo directo: representa el transporte horizontal neto de la pluma de NO_2. Una divergencia positiva indica que la celda evaluada exporta masa hacia su entorno (comportándose como la verdadera fuente física

de emisión), mientras que una divergencia negativa (convergencia) señala una celda receptora donde el viento acumula masa proveniente de fuentes ubicadas aguas arriba.

La resolución computacional de este término exigió una discretización cuidadosa de las derivadas espaciales. Para preservar el aislamiento orográfico impuesto por la compleja topografía de Chile Central y evitar una mezcla numérica irreal entre cuencas atmosféricas adyacentes (transporte espurio a través de barreras montañosas), además de evitar una pérdida elevada de datos por píxeles sin valor (filtrados por el satélite) la derivada topológica se calculó mediante un esquema de diferencias finitas centrales de segundo orden.

Para garantizar el rigor matemático sobre la superficie terrestre, el operador cartesiano clásico fue sustituido por su formulación exacta en coordenadas esféricas. La implementación computacional transformó las distancias angulares en diferenciales métricos reales y aplicó una corrección geométrica proporcional a la tangente de la latitud. Este último término corrector es indispensable para compensar la reducción natural de la distancia entre los meridianos a medida que avanzan hacia el polo sur, evitando la introducción de sesgos sistemáticos en la cuantificación del transporte meridional.

2.4.4. Parametrización de la fotoquímica

A diferencia del modelo de caja, el FDA requiere que los parámetros químicos respondan a la variabilidad espacial.

El tiempo de vida (τ) se calcula dinámicamente para cada píxel utilizando la constante de reacción dependiente de la temperatura y las concentraciones del radical OH extraídas de CHIMERE, basándose en la cinética recomendada por la NASA [Burkholder et al., 2020].

$$\tau = \frac{1}{K(T)[OH]} \tag{2.11}$$

$$K(T) = K_{298} \cdot (\frac{T}{298})^{(-m)} \tag{2.12}$$

Donde $K_{298} = 2.8 \times 10^{-11} cm^3 molec^{-1} s^{-1}$ es la constante de reacción aproximada a 298k, con $m = 1.3$.

Por otro lado, bajo el supuesto de que la concentración de óxidos de nitrógeno es equivalente a la suma entre las concentraciones de monóxido y dióxido de nitrógeno ($[NO_x] = [NO] + [NO_2]$) el factor de partición (L) se define empíricamente para cada celda utilizando las salidas directas del modelo fotoquímico como:

$$L = \frac{[NO] + [NO_2]}{[NO_2]} \tag{2.13}$$

capturando los regímenes de ozono locales.

2.4.5. Rotación del campo de viento al swath del satélite

Para evitar el difuminado espacial y la pérdida de gradientes agudos que ocurren al interpolar las observaciones satelitales hacia grillas cartesianas regulares, la ecuación de divergencia se resuelve directamente sobre la malla geométrica original del satélite. Dado que esta grilla curvilínea se encuentra deformada debido a la trayectoria y la inclinación de la órbita polar heliosincrónica de Sentinel-5P, se vuelve estrictamente necesario aplicar una transformación cinemática sobre los campos de viento meteorológicos. Los vectores de viento horizontal zonal (U) y meridional (V) provistos por el modelo WRF —originalmente alineados con los ejes geográficos estándar Este-Oeste y Norte-Sur— pierden su ortogonalidad respecto a las fronteras físicas orientadas de los píxeles de TROPOMI. Por consiguiente, se requiere una proyección vectorial dinámica capaz de reorientar el campo cinemático desde el sistema cartesiano global hacia los ejes locales intrínsecos de la matriz de barrido, denominados componentes a lo largo del rastro y a través del rastro.

Esta adecuación geométrica se resuelve mediante la implementación de un algoritmo matricial optimizado basado en la metodología de inversión de flujos desarrollada por Bryan Lotte (2022) [Lotte, 2022]. El procedimiento opera calculando primero los diferenciales espaciales de latitud ($\Delta\phi$) y longitud ($\Delta\lambda$) a lo largo del eje horizontal de píxeles del sensor, utilizando las coordenadas de los vértices de las celdas nativas. Posteriormente, se determina el ángulo de inclinación local (θ) píxel a píxel mediante la aplicación de la función arcotangente de cuatro cuadrantes (atan2), la cual procesa de manera automática los signos de los diferenciales geométricos para resolver la ambigüedad de los cuadrantes trigonométricos y prevenir indeterminaciones numéricas por división por cero. El signo negativo antepuesto al operador analítico hereda la convención matemática del modelo de referencia, asegurando la consistencia física respecto al sentido de rotación de la plataforma espacial. Finalmente, la proyección de la masa de aire se ejecuta mediante la convolución de los componentes originales con una matriz de rotación estándar en dos dimensiones, deduciendo los componentes cinemáticos transformados (U_{s5p} y V_{s5p}) a través del siguiente sistema acoplado:

$$U_{s5p} = U \cdot \cos(\theta) - V \cdot \sin(\theta) \tag{2.14}$$

$$V_{s5p} = U \cdot \sin(\theta) + V \cdot \cos(\theta) \tag{2.15}$$

Esta formulación vectorial garantiza que el término de transporte horizontal ($\nabla \cdot \mathbf{F}$) evaluado posteriormente en la ecuación diferencial FDA cuantifique con absoluta precisión el flujo de masa neto que atraviesa las caras reales de cada celda del satélite, neutralizando sesgos sistemáticos en el balance de masa que surgirían al ignorar la oblicuidad de la órbita sobre la geografía de Chile Central.

2.4.6. Conversión de unidades y conservación de masa

La implementación del modelo exige rigurosas transformaciones estequiométricas y dimensionales. En primer lugar, las concentraciones de gases traza entregadas por CHIMERE en partes por billón (ppb) se convierten a densidad numérica absoluta (molec/cm^3) aplicando la Ley de los Gases Ideales, parametrizada con la temperatura, la presión local extraída y el Número de Avogadro (N_A). Por su parte, la resolución de la ecuación de conservación de masa arroja una tasa de emisión en formato de flujo instantáneo (Pmolec/cm^2/s). Para escalar este resultado a un formato estándar de inventarios de emisión, el flujo Top-Down se multiplica por el área geométrica real de cada celda calculada dinámicamente en metros cuadrados a partir de sus gradientes de latitud y longitud, y por la masa molar del dióxido de nitrógeno (0.046 kg/mol), obteniendo finalmente una tasa de emisión másica absoluta en kilogramos por hora (kg/h).

2.4.7. Variabilidad diurna y Factor de Expansión Diaria (FED) en el modelo FDA

La aplicación del algoritmo de Divergencia de Flujo (FDA) sobre las observaciones satelitales de TROPOMI proporciona una estimación de la tasa de emisión instantánea, representativa únicamente de la ventana temporal correspondiente al sobrevuelo del instrumento (aproximadamente a las 14:00 hora local para Chile Central). Para extrapolar esta cuantificación horaria hacia un presupuesto de masa diario acumulado (M_{diaria}), resulta crítico abandonar la asunción de una tasa de emisión constante, la cual introduciría un severo sesgo al asignar un peso relativo estático de $1/24$ (o $\sim 4.16\%$) a cada hora del día. En consecuencia, se hace metodológicamente imperativo acoplar un Factor de Expansión Diaria (FED) dinámico, fundamentado en la fenomenología de las fuentes de emisión predominantes en el dominio de estudio.

En la cuenca de Santiago y en Chile Central, el sector transporte constituye la fuente antropogénica estructurante de las emisiones superficiales de óxidos de nitrógeno (NO_x), tal y como detalla Álamos en la publicación del inventario INEMA. Debido a esta fuerte dependencia sectorial, la variabilidad temporal de la emisión de NO_2 hacia la atmósfera se encuentra estrictamente acoplada a los ciclos de movilidad urbana y a los patrones de tráfico regionales. [Álamos et al., 2022]

La caracterización de estos patrones en días hábiles (lunes a viernes) revela un comportamiento marcadamente bimodal, dominado por los viajes pendulares hacia los centros de actividad durante las horas punta de la mañana y de la tarde. Según los modelos de asignación de tráfico y las desagregaciones temporales basadas en datos de la Unidad Operativa de Control de Tránsito (UOCT), el horario del mediodía y la primera hora de la tarde experimentan un descenso de la actividad vehicular, conformando una meseta de inter-congestión temporal. El análisis normalizado de los histogramas de flujo vehicular determina que la participación representativa del parque automotor en la ventana de las 14:00 horas corresponde a una fracción aproximada del 6.0% respecto al volumen acumulado de las 24 horas. [Ministerio de Transportes y Telecomunicaciones de Chile, 2011]

Asimismo, investigaciones en Norteamérica respaldan que la fracción de emisión horaria en valles de tráfico alcanza aproximadamente un 6% del volumen diario acumulado en el horario en que se realiza la

estimación. [Batterman et al., 2015]

La presente investigación adopta esta fracción empírica para definir el escalar de agregación. El Factor de Expansión Diaria (FED) se obtiene como el inverso de esta participación horaria representativa:

$$FED = \frac{1}{0.06} \approx 16.67 \tag{2.16}$$

La masa total diaria se estima multiplicando la tasa horaria instantánea evaluada mediante la ecuación de continuidad (FDA) por el FED correspondiente:

$$E_{\text{diaria}} = E_{14:00} \times FED \tag{2.17}$$

La integración matemática del factor constante $FED = 16.67$ en el modelo de extrapolación temporal permite escalar la medición puntual del satélite hacia el total diario respetando la fenomenología del tráfico. Esta aproximación física es fundamental, ya que compensa intrínsecamente la casi nula actividad de las fuentes móviles durante el horario nocturno (00:00 - 05:00 hrs) y asimila de forma indirecta las emisiones máximas de los picos matutinos y vespertinos, mitigando la severa sobreestimación que genera el multiplicador geométrico estático de 24 horas.

Cabe resaltar que este factor asume que todas las celdas del dominio siguen la misma curva bimodal de tráfico urbano, el modelo penaliza matemáticamente a las fuentes puntuales continuas. Complejos industriales termodinámicamente activos las 24 horas del día (tales como termoeléctricas en el polo de Quintero-Puchuncaví o la logística del nodo portuario) experimentan una subestimación inherente. Esta limitación metodológica debe ser considerada al interpretar las estimaciones de celdas industriales aisladas.

2.5. Análisis de sensibilidad e incertidumbre

La presente sección aborda la evaluación de la robustez y confiabilidad estadística del inventario Top-Down generado mediante el modelo FDA. En primer lugar, se desarrolla un análisis de variabilidad espacio-temporal enfocado en puntos de control específicos, cuyo propósito es aislar y caracterizar la dispersión diaria de los regímenes de emisión locales frente a fluctuaciones meteorológicas y antropogénicas. En segundo lugar, se implementa un riguroso esquema de propagación analítica de incertidumbre a nivel de dominio total en base a los errores incorporados por las variables de entrada del modelo FDA.

2.5.1. Variabilidad espacio-temporal

Para evaluar la sensibilidad de las estimaciones del modelo de Divergencia de Flujo (FDA) frente a las fluctuaciones meteorológicas y de actividad antropogénica, se implementó un análisis de variabilidad diaria

focalizado en los tres puntos de control previamente definidos 2.3. Este procedimiento permite aislar la señal local y cuantificar su dispersión estadística a lo largo de la serie temporal.

Extracción espacial por vecino más cercano

Dada la naturaleza discreta de la grilla de asimilación (basada en la resolución de CHIMERE), la extracción de los datos para cada punto de interés se realiza mediante un algoritmo de colocación espacial por vecino más cercano (*nearest-neighbor*). Para cada coordenada geográfica objetivo (lat_{tgt}, lon_{tgt}), se calcula la distancia euclidiana respecto a todos los elementos de las matrices bidimensionales de latitud $(lat_{i,j})$ y longitud $(lon_{i,j})$ del dominio. Los índices espaciales óptimos (y, x) se determinan minimizando dicha distancia:

$$(y, x) = \arg\min_{i,j} \sqrt{(lat_{i,j} - lat_{tgt})^2 + (lon_{i,j} - lon_{tgt})^2} \tag{2.18}$$

Una vez identificada la celda correspondiente, se extrae el valor diario de la emisión superficial neta de NO_x (en kg/h) para cada día válido del mes analizado, conformando así una serie de tiempo continua para cada nodo de evaluación.

Evaluación estadística y distribución de densidad

Con el objetivo de caracterizar la dispersión diaria y la incertidumbre asociada a la volatilidad de las emisiones estimadas, las series de tiempo extraídas son sometidas a un análisis estadístico y visual:

- **Evolución temporal continua:** Se evalúa la trayectoria diaria de las emisiones para identificar la presencia de ciclos semanales (diferencias entre días hábiles y fines de semana) y detectar anomalías episódicas asociadas a condiciones meteorológicas extremas o variaciones bruscas en la actividad local.
- **Dispersión de rango intercuartílico (Diagramas de caja):** Para cuantificar la variabilidad central de las estimaciones diarias, se analiza la distribución de las emisiones mediante el Rango Intercuartílico (IQR). Esta métrica permite establecer la mediana y el promedio mensual por nodo, facilitando la identificación de valores atípicos (*outliers*) que escapan de la dinámica de emisión habitual.
- **Densidad de probabilidad (Gráficos de violín):** Con el fin de visualizar la forma de la distribución subyacente de los datos, se modela la densidad de probabilidad de las emisiones diarias. Este enfoque permite identificar si la zona de estudio presenta un comportamiento de emisión unimodal (constante), bimodal (con regímenes de emisión fuertemente diferenciados) o sesgado, ofreciendo una caracterización más profunda que la estadística descriptiva tradicional.

2.5.2. Propagación analítica de incertidumbre

La cuantificación de emisiones de NO_x mediante enfoques satelitales *Top-Down* está sujeta a incertidumbres instrumentales y de modelamiento que varían espacial y temporalmente. Para preservar las covarianzas físicas diarias entre los campos meteorológicos, la química atmosférica y las recuperaciones satelitales, la incertidumbre final del inventario no se estima sobre los promedios mensuales, sino que se evalúa de manera dinámica calculando el error absoluto día a día (i) en cada celda de la grilla, antes de proceder a su agregación temporal.

Cuantificación de las fuentes de error individual

La varianza total de la emisión estimada requiere caracterizar las incertidumbres relativas de cada variable física de entrada. En esta investigación, se adopta un enfoque híbrido: se utiliza la precisión dinámica explícita para la observación satelital, mientras que para los parámetros derivados de los modelos de transporte químico (CTM) y meteorológicos se adoptan márgenes de error constantes fundamentados en análisis de sensibilidad de la literatura especializada [Patel et al., 2026].

Las fuentes de incertidumbre asignadas a los insumos del modelo de Divergencia de Flujo (FDA) son las siguientes:

- **Incertidumbre instrumental de la columna ($\sigma_{V,i}$):** Se extrae diariamente la variable de precisión de la columna troposférica (`nitrogendioxide_tropospheric_column_precision`) contenida en el producto L2 original de TROPOMI. Este valor captura dinámicamente el error del ajuste espectral (*slant column*) y el cálculo del Factor de Masa de Aire (AMF) píxel a píxel, constituyendo típicamente la mayor fuente de error en zonas de baja concentración de NO_2.
- **Incertidumbre cinemática del viento (σ_w/w):** Se adopta una incertidumbre relativa constante del 30% para la velocidad del viento simulada por WRF dentro de la Capa Límite Planetaria (PBL). Este valor es consistente con las discrepancias observacionales reportadas para campos de viento en resoluciones mesoscalares aplicadas a la estimación de emisiones [Beirle et al., 2011, Lorente et al., 2019].
- **Incertidumbre del tiempo de vida (σ_τ/τ):** Atribuida a la variabilidad espacio-temporal de la concentración del radical OH y de las constantes cinéticas dependientes de la temperatura. Basado en el estudio de Dix, se asume un error del 30% sobre el decaimiento fotoquímico del gas. [Dix et al., 2022]
- **Incertidumbre del factor de partición (σ_L/L):** Asociada al escalamiento empírico de NO_2 a NO_x. La relación simulada por el modelo CHIMERE conlleva una incertidumbre estructural dependiente de los regímenes locales de ozono, estimada conservadoramente en un 15% para entornos urbanos e industriales. [Laughner and Cohen, 2019]

Formulación matemática de la propagación diaria

Asumiendo independencia estadística entre los errores instrumentales del satélite y las incertidumbres estructurales de los modelos numéricos, la propagación analítica se aplica sobre la ecuación de continuidad en estado estacionario.

Para un día específico (i), la incertidumbre relativa del término de sumidero químico ($S_i = L_i V_i / \tau_i$) y del término de divergencia del flujo de masa ($D_i = \nabla \cdot (L_i V_i \mathbf{w}_i)$) se expresa como la suma en cuadratura de sus errores fraccionales. Al multiplicar esta suma fraccional por el valor absoluto del término en esa celda, se obtienen las incertidumbres absolutas diarias expresadas en masa (kg/h):

$$\sigma_{S,i} = |S_i| \cdot \sqrt{\left(\frac{\sigma_L}{L}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{V,i}}{V_i}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_\tau}{\tau}\right)^2} \tag{2.19}$$

$$\sigma_{D,i} = |D_i| \cdot \sqrt{\left(\frac{\sigma_L}{L}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{V,i}}{V_i}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_w}{w}\right)^2} \tag{2.20}$$

Dado que la emisión neta diaria (E_i) es la suma aditiva de ambas componentes ($E_i = S_i + D_i$), la incertidumbre absoluta total por celda para el día i resulta en:

$$\sigma_{E,i} = \sqrt{\sigma_{S,i}^2 + \sigma_{D,i}^2} \tag{2.21}$$

Agregación mensual de la incertidumbre

Una vez calculados los errores absolutos para cada órbita diaria asimilada en la grilla, se procede a estimar la incertidumbre del inventario consolidado. Suponiendo que las variaciones instrumentales y meteorológicas diarias actúan como variables aleatorias independientes a lo largo del mes, la incertidumbre absoluta del promedio mensual de las emisiones ($\sigma_{E,mes}$) se cuantifica aplicando la regla de propagación del error estándar de la media:

$$\sigma_{E,mes} = \frac{1}{N_i} \sqrt{\sum_{i=1}^{N_i} \sigma_{E,i}^2} \tag{2.22}$$

Donde N_i representa la cantidad de días con observaciones satelitales válidas asimiladas en esa celda espacial específica durante el mes analizado.

Finalmente, para fines de evaluación comparativa y representación cartográfica, la incertidumbre relativa final del inventario (U_{rel}) se reporta como el porcentaje de la desviación estándar mensual respecto al promedio de la emisión mensual estimada en dicha celda:

$$U_{rel}(\%) = \left(\frac{\sigma_{E,mes}}{|E_{mes}|} \right) \times 100 \tag{2.23}$$

Tratamiento estadístico del ruido instrumental y filtrado espacial

En la teledetección de especies traza, la métrica de precisión instrumental original ($\sigma_{V,i}$) reportada en los productos L2 cuantifica principalmente el ruido aleatorio de alta frecuencia del sensor óptico. En zonas de fondo (*background*) carentes de fuentes antropogénicas, la magnitud de la columna troposférica de NO_2 tiende al límite de detección del instrumento. Bajo estas condiciones, la división por valores cercanos a cero induce una divergencia matemática en el cálculo del error relativo diario a nivel de celda, generando magnitudes anómalas que representan la ausencia de señal del gas y no una degradación en la capacidad del modelo.

Para abordar esta limitación metodológica, el tratamiento de la incertidumbre se estructura en dos etapas analíticas. En primera instancia, la estabilización del ruido aleatorio instrumental se delega al proceso de agregación temporal detallado en la ecuación anterior. Al asumir independencia estadística entre las observaciones diarias, la sumatoria en cuadratura cancela inherente y progresivamente las fluctuaciones extremas del satélite a lo largo del mes.

En segunda instancia, para el reporte y análisis de las métricas de error global del inventario, se implementa un algoritmo de filtrado espacial basado en umbrales físicos. La estadística descriptiva de la incertidumbre relativa (promedio, mediana y percentiles) se computa de manera exclusiva sobre un subconjunto del dominio, aislando aquellas celdas que constituyen fuentes activas. Para este propósito, se aplica una máscara espacial que descarta los píxeles con tasas de emisión neta mensual inferiores al umbral de ruido del modelo (establecido operativamente en $E_{mes} \leq 2.0$ kg/h).

La aplicación de esta restricción de dominio garantiza que los indicadores de incertidumbre reportados caractericen de manera objetiva el desempeño de la ecuación de Divergencia de Flujo sobre las plumas urbanas, logísticas e industriales, evitando el sesgo estadístico provocado por los efectos de cancelación numérica ($S_i \approx -D_i$) propios de la dinámica en zonas rurales y cordilleranas.

2.6. Entorno computacional y herramientas de análisis

El procesamiento de datos, la asimilación matemática y la visualización de los resultados se implementaron íntegramente mediante rutinas estructuradas en el lenguaje de programación Python (versión 3.10.20). Para la ingesta y manipulación eficiente de grandes volúmenes de datos multidimensionales en formato NetCDF derivados de satélites y modelos, se empleó la librería *xarray*.

Las transformaciones de grillas espaciales (regridding) entre los dominios de CHIMERE, TROPOMI e INEMA se ejecutaron mediante la herramienta *xESMF*, aplicando algoritmos de interpolación bilineal para

variables meteorológicas continuas y métodos conservativos para preservar la masa en los campos de emisión espacial. Los cálculos matriciales vectorizados para la física de la divergencia se desarrollaron con la librería *NumPy*, mientras que el análisis estadístico de series de tiempo e incertidumbre fue gestionado mediante *Pandas*.

Las constantes químicas y físicas fueron extraídas de librerías existentes (*scipy.constants*, *metpy.constants*, *molmass*, entre otras).

Finalmente, la cartografía de alta resolución, la generación de mapas base empleando capas de OpenStreetMap, y la representación visual de distribuciones estadísticas (diagramas de caja y violín) se construyeron utilizando las bibliotecas *Matplotlib*, *Seaborn* y el motor geoespacial *Cartopy*.

2.7. Síntesis del capítulo

En resumen, la metodología expuesta establece un marco computacional y físico robusto para la estimación *Top-Down* de emisiones superficiales de óxidos de nitrógeno (NO_x) en la compleja orografía de Chile Central. El flujo de trabajo comienza con el refinamiento de la sensibilidad instrumental de TROPOMI, sustituyendo el perfil vertical *a priori* global por simulaciones regionales acopladas de WRF-CHIMERE. Esta corrección asegura que la masa asimilada refleje fielmente la acumulación térmica y mecánica de contaminantes dentro de la Capa Límite Planetaria local.

Sobre esta base observacional depurada, el núcleo analítico de la investigación se desarrolla mediante el Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA). Superando las asunciones estáticas de un modelo de caja convencional, el algoritmo resuelve de manera explícita la ecuación de conservación de masa, incorporando parámetros fotoquímicos dinámicos (tiempo de vida y factor de partición). Para garantizar el rigor topológico y evitar la pérdida de gradientes espaciales por difusión numérica, el término de transporte advectivo se resuelve directamente sobre la malla geométrica original del satélite (*swath*), apoyado por una precisa rotación cinemática y matricial de los campos de viento locales.

Posteriormente, la traducción de las tasas instantáneas de emisión a presupuestos másicos diarios se logra mediante la integración de un Factor de Expansión Diaria (FED). Este escalar dinámico abandona el supuesto irreal de emisiones constantes y asimila empíricamente la fenomenología bimodal del sector transporte, principal estructurante del inventario de NO_x en la región.

Finalmente, la confiabilidad de los resultados se evalúa mediante un esquema de propagación analítica diaria de incertidumbres, el cual combina el error instrumental con los márgenes estructurales de los modelos numéricos, aplicando filtros espaciales para aislar físicamente las fuentes activas. Toda esta cadena de geoprocesamiento, implementada mediante algoritmos vectorizados y esquemas de interpolación diferenciados en Python, dota a la investigación de las herramientas necesarias para evaluar objetivamente los inventarios oficiales *Bottom-Up* en los capítulos posteriores.

Capítulo 3

Aplicación del modelo de Divergencia de Flujo (FDA) y estimación de emisiones

El presente capítulo expone el desarrollo, implementación y resultados del modelo de Divergencia de Flujo (FDA) utilizado para la estimación Top-Down de emisiones de óxidos de nitrógeno (NO_x) en Chile Central. Siguiendo el esquema metodológico trazado para esta investigación, este capítulo describe paso a paso la construcción matemática y computacional del inventario satelital. Se inicia con el procesamiento de las observaciones del instrumento TROPOMI y los campos meteorológicos, para luego profundizar en la parametrización de las variables físicas que componen la ecuación de continuidad atmosférica (transporte espacial, sumidero y partición química). Posteriormente, se evalúa la sensibilidad del modelo ante la variabilidad interanual del perfil vertical a priori proveniente del modelo CHIMERE, culminando con la presentación de la distribución espacio-temporal de las emisiones resultantes. De este modo, el capítulo transita desde el tratamiento de los datos crudos hasta la obtención del mapa final de emisiones, estableciendo la base fenomenológica para los análisis de intercomparación y variabilidad que se abordarán posteriormente.

3.1. Observaciones satelitales de NO_2

Esta sección detalla el flujo operativo ejecutado para consolidar la base de datos observacional proveniente del instrumento TROPOMI. En primer lugar, se expone el proceso de consulta, descarga masiva y la aplicación de estrictos criterios de filtrado de calidad a los productos satelitales de Nivel 2 (L2). Posteriormente, se desarrolla una validación visual preliminar de las matrices espaciales extraídas, con el propósito de corroborar cualitativamente la distribución espacial de las emisiones de NO_x en el territorio de Chile continental.

3.1.1. Proceso de descarga

La adquisición de densidades de columna de NO_2 desde la misión Sentinel-5P representa un desafío computacional significativo debido al alto volumen de datos (aproximadamente 500 MB por órbita) y la compleja estructura jerárquica de los archivos NetCDF4 de Nivel 2 (L2). Para abordar esta limitante, se diseñó e implementó un algoritmo automatizado en Python capaz de interactuar dinámicamente con la interfaz de programación de aplicaciones (API) OData del *Copernicus Data Space Ecosystem*.

El flujo de trabajo, esquematizado a continuación, opera bajo un enfoque de "inteligencia espacial" y eficiencia de almacenamiento:

En primera instancia, el algoritmo gestiona de manera dinámica los *tokens* de autenticación, asegurando la continuidad operativa durante descargas masivas de largas series de tiempo. Para garantizar la homogeneidad e integridad del conjunto de datos a lo largo de distintos años, la consulta a la API se estructuró con tolerancia de versionamiento, absorbiendo automáticamente productos con calidad científica reprocesada (RPRO) para años históricos, o su equivalente *Offline* (OFFL) para periodos recientes donde la Agencia Espacial Europea (ESA) aún no ejecuta campañas de actualización.

Dado que la órbita polar heliosincrónica de TROPOMI genera traslapes en altas latitudes, es frecuente que un mismo día presente múltiples pasadas orbitales (típicamente entre las 17:00 y 19:00 UTC) que interceptan marginalmente el dominio de estudio geográfico de Chile. Para asegurar que el modelo físico asimile únicamente las observaciones cenitales de mayor calidad y evitar distorsiones por el borde del *swath*, se programó un módulo de evaluación de huellas espaciales (*footprints*). Utilizando operaciones vectoriales, el algoritmo extrae el polígono WKT (*Well-Known Text*) de cada órbita candidata desde los metadatos de la API, y calcula matemáticamente su área de intersección con la caja delimitadora (BBOX) de Chile continental (que contiene la zona de estudio). Las órbitas son ordenadas descendentemente según su cobertura real, seleccionando y descargando exclusivamente aquella que constituye la "órbita maestra" del día.

Finalmente, para mitigar el costo de almacenamiento, el procesamiento se ejecuta mediante un *pipeline* de recortes en memoria. La órbita maestra se descarga de manera temporal y es sometida a un enmascaramiento espacial basado en coordenadas geográficas. Utilizando arreglos multidimensionales, el código extrae estrictamente los píxeles contenidos en el dominio y reconstruye un nuevo archivo NetCDF4 de peso reducido, conservando meticulosamente la jerarquía original de grupos de la ESA (`PRODUCT`, `GEOLOCATIONS`, `INPUT_-`

`DATA` y `DETAILED_RESULTS`). Este riguroso geoprocesamiento preserva las matrices de presiones, factores de masa de aire (AMF) y *Averaging Kernels* (AK) en sus dimensiones nativas, posibilitando su posterior acoplamiento matemático sin pérdida de metadatos instrumentales.

El código fuente empleado para la adquisición de los datos de columna troposférica de NO_2 del satélite Sentinel-5p se encuentra disponible en el repositorio de GitHub de elaboración propia al cual se puede acceder mediante el siguiente enlace: https://github.com/marcos-pereira-2001/Descarga-de-datos-satelitales-Sentinel-5p.git

3.1.2. Validación visual

La exploración inicial de las densidades de columna troposférica de dióxido de nitrógeno (NO_2) requiere un riguroso control de calidad para evitar sesgos introducidos por la cobertura nubosa, el albedo superficial o errores algorítmicos de recuperación (*retrieval*). Siguiendo las directrices del manual de usuario del instrumento TROPOMI [Copernicus Sentinel-5P (processed by ESA), 2021], se aplicó un filtro estricto de aseguramiento de calidad, descartando todo píxel con un valor $qa\_value \leq 0.75$. Si bien este umbral garantiza la idoneidad física de los datos para el modelamiento posterior, su aplicación sobre una órbita diaria individual genera vacíos espaciales (*data gaps*) significativos en el dominio, tal como se documenta en el anexo A.1. Esta pérdida de cobertura representa una limitación intrínseca de los sensores pasivos que operan en el espectro UV-Vis, los cuales no logran penetrar nubes ópticamente gruesas.

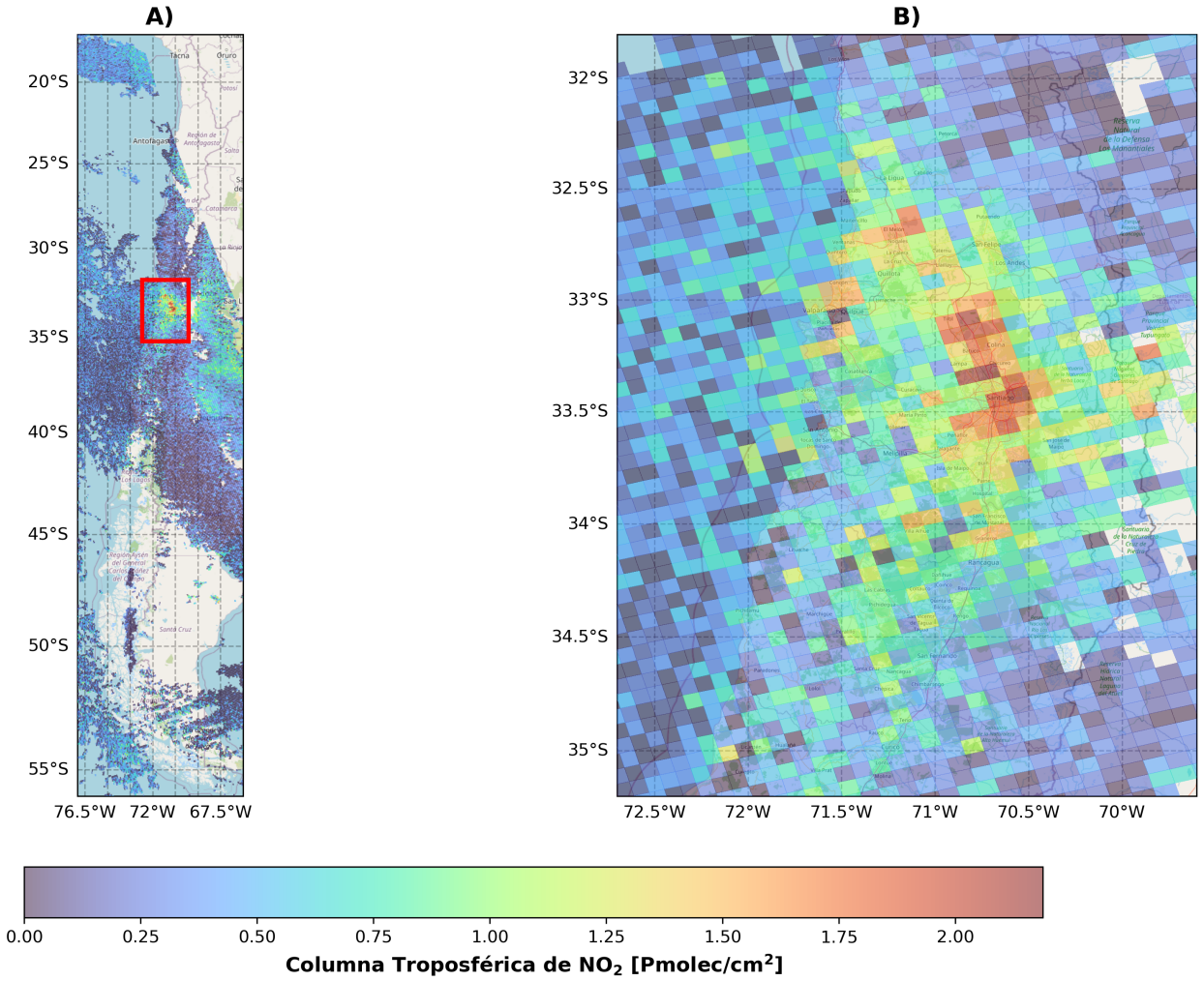


Figura 3.1: Mapa de la columna troposférica de NO_2 medida por TROPOMI filtrada por aseguramiento de calidad ($qa\_value > 0.75$) para el 1 de enero de 2019 en A) Chile continental y B) Chile central.

A pesar de las limitaciones de cobertura diaria impuestas por el filtrado, la validación espacial confirma que el instrumento captura exitosamente la señal física subyacente. Como se aprecia en la Figura 3.1, la Región Metropolitana de Santiago destaca nítidamente como el principal núcleo de acumulación antropogénica del dominio, exhibiendo un conglomerado de píxeles (*hotspot*) con densidades de columna que superan los 2 Pmolec/cm^2. Esta detección empírica preliminar corrobora la pertinencia del área de estudio y demuestra la alta sensibilidad de TROPOMI para aislar plumas de contaminación a escala de ciudad.

No obstante, al analizar la topología de la matriz espacial nativa (*swath*), se evidencia un desafío geométrico crítico para el modelamiento de transporte. La resolución espacial del instrumento no es constante, sino que está sujeta a una severa deformación dependiente del ángulo de visión del satélite, un fenómeno documentado en fotogrametría satelital como el efecto *bow-tie*.

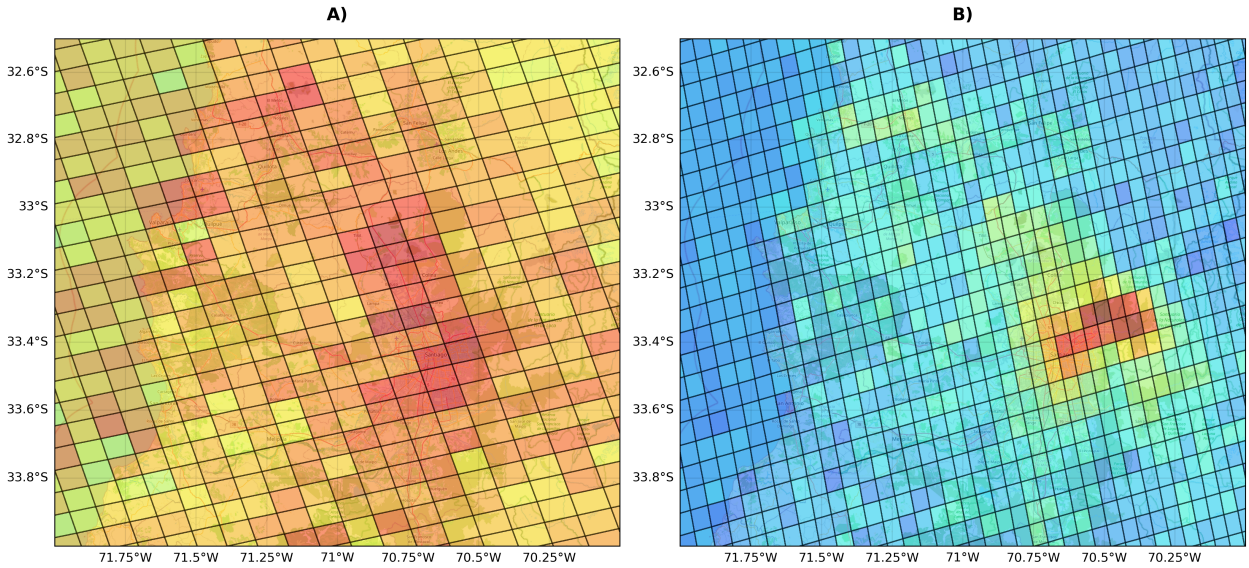


Figura 3.2: Evidencia de la distorsión geométrica diaria de la grilla de TROPOMI sobre Chile Central. A): Pasada cercana al nadir del instrumento (1 de enero de 2019). B): Pasada capturada en el extremo del barrido del sensor (15 de enero de 2019), evidenciando el ensanchamiento e inclinación de los píxeles (efecto *bow-tie*).

Como se ilustra en la Figura 3.2, las órbitas que transitan directamente sobre el dominio de estudio conservan píxeles con una morfología cuasi-rectangular, manteniendo una resolución próxima a la nominal (3.5×5.5 km^2). Por el contrario, en los días donde el área de estudio es observada desde el límite de la franja de barrido, las celdas sufren un estiramiento dramático, rotando su eje longitudinal de manera oblicua respecto a las coordenadas geográficas estándar. Ver Anexo A.2 como referencia de la variación en las órbitas diarias obtenidas.

Esta variabilidad topológica interdiaria subraya la invalidez matemática de utilizar grillas de interpolación estáticas. En consecuencia, justifica plenamente la decisión algorítmica de conservar la malla nativa de observación y ejecutar transformaciones trigonométricas para rotar dinámicamente los vectores de viento, garantizando así un cálculo riguroso del flujo de masa en el modelo FDA.

3.2. El perfil vertical a priori

Antes de consolidar el inventario de emisiones top-down mediante el modelo FDA, resulta imperativo adecuar la sensibilidad del sensor satelital a las condiciones dinámicas locales. Con este propósito, esta sección reporta el proceso de recálculo y acoplamiento de los perfiles verticales a priori simulados por CHIMERE sobre las columnas de TROPOMI, que permite mitigar los errores sistemáticos de los promedios globales. Adicionalmente, el análisis se extiende hacia la validación del uso del perfil vertical correspondiente al año 2019 de manera extendida para todo el horizonte temporal evaluado.

3.2.1. Reemplazo del perfil a priori de TROPOMI con CHIMERE

El producto estándar de NO_2 troposférico de TROPOMI utiliza perfiles verticales a priori derivados del modelo global de asimilación de datos TM5-MP, el cual opera a una resolución espacial de $1° \times 1°$. Si bien esta aproximación es válida a escala global, resulta insuficiente para capturar los fuertes gradientes de concentración en dominios de orografía compleja y alta densidad urbana como Chile central.

Para subsanar esta limitación, se procedió a reemplazar el perfil global por los perfiles verticales de alta resolución simulados por el modelo CHIMERE. Este proceso de acoplamiento físico requirió la convolución matemática de los perfiles de CHIMERE con los *averaging kernels* y los pesos de dispersión altitudinal propios de cada píxel de TROPOMI. Ver sección 2.3.2 de la metodología para mayor detalle.

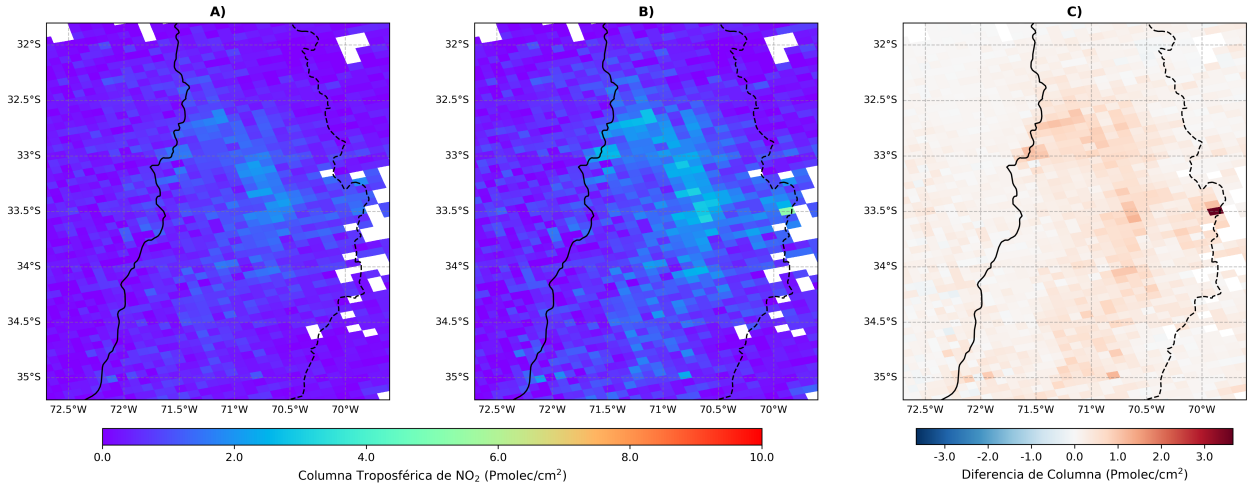


Figura 3.3: Columna troposférica de NO_2 de TROPOMI en Chile central para el 1 de enero de 2019. A) Perfil original TM5-MP, B) perfil mejorado con CHIMERE, C) diferencia B-A.

Los resultados espaciales expuestos en la Figura 3.3 demuestran una mejora sustancial en la representación y gradiente de la contaminación superficial. Al incorporar la meteorología local y la dinámica de emisiones de alta resolución de CHIMERE, la densidad de columna vertical experimenta una redistribución heterogénea a lo largo del dominio. La variación promedio relativa obtenida para la Figura 3.3 es del 44.11%, valor que se mantiene en niveles similares para los días de verano con buena recuperación de datos a lo largo de los años 3.6. En los principales focos de emisión, tales como la conurbación de la Región Metropolitana y las zonas industriales costeras de la Región de Valparaíso, se observa un incremento neto en las columnas recalculadas, el cual mitiga el efecto de suavizado espacial característico del modelo TM5-MP global.

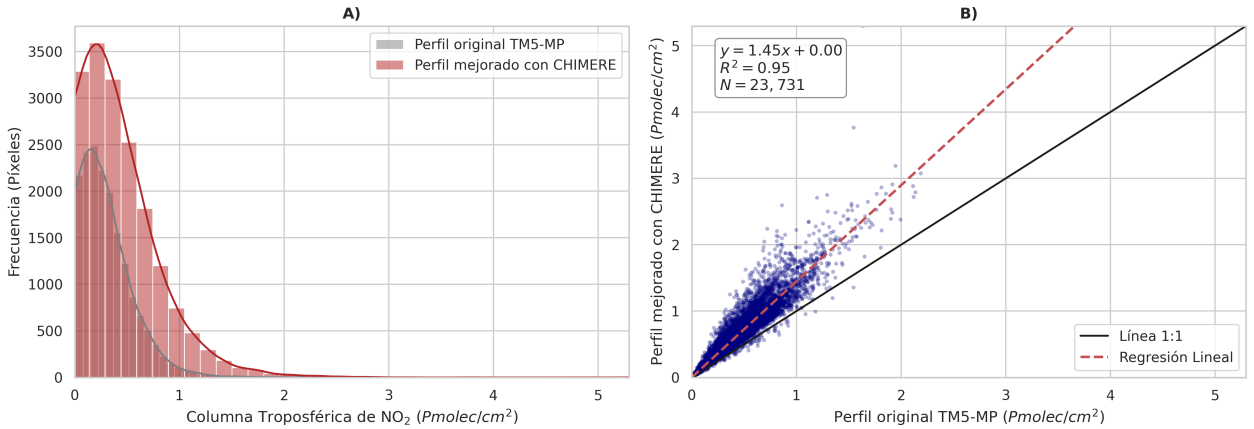


Figura 3.4: Comparación entre las columnas troposféricas de NO_2 con perfiles original (TM5) y modificado (CHIMERE) en Chile central para el 1 de enero de 2019. A) Histograma de frecuencias, y B) dispersión y regresión lineal de los puntos

Para cuantificar de forma rigurosa este impacto, la Figura 3.4 evalúa el comportamiento estadístico píxel a píxel de ambas recuperaciones. El análisis de frecuencias revela que, si bien ambas poblaciones mantienen distribuciones asimétricas positivas típicas de gases traza urbanos, la curva de CHIMERE exhibe una menor frecuencia de valores basales intermedios y desplaza su masa hacia la cola alta de la distribución. Esto constata matemáticamente la intensificación de las columnas troposféricas en las celdas altamente contaminadas.

Por su parte, el diagrama de dispersión de densidad bidimensional ratifica la existencia de un sesgo sistemático entre ambos productos. A pesar de que se conserva una correlación aceptable debido a que comparten la misma señal de radiancia cruda medida por el satélite, la pendiente de la recta de regresión lineal ($y = mx+n$) resulta superior a la unidad ($m > 1$). Este comportamiento evidencia que a medida que aumenta la magnitud de la columna, la discrepancia entre CHIMERE y TM5-MP se amplifica de forma exponencial. El sesgo medio positivo (*Mean Bias*) observado confirma que el uso de perfiles locales simulados incrementa el Factor de Masa de Aire (AMF) efectivo en zonas limpias pero reduce el AMF en zonas saturadas, lo que por consecuencia matemática eleva el valor final de la VCD troposférica sobre las ciudades de Chile central.

Este recálculo resulta fundamental para el diseño metodológico de la investigación: al corregir la subestimación instrumental de TROPOMI sobre áreas urbanas densas, se proporciona un campo de observaciones corregidas significativamente más robusto. Esto ancla de manera exitosa la asimilación de datos del modelo FDA a la estructura vertical real de la capa límite planetaria del dominio, previniendo que el algoritmo de inversión interprete errores geométricos de recuperación satelital como sumideros o fuentes espurios de emisión.

El algoritmo de reemplazo del perfil a priori de TROPOMI utilizando perfiles extraidos de CHIMERE empleado en la presente investigación se encuentra alojado en el repositorio de GitHub de elaboración propia en el siguiente enlace: https://github.com/marcos-pereira-2001/VCD-TROPOMI-Reemplazo-de-perfil-TM5-

MP-a-CHIMERE.git

3.2.2. Aplicación del perfil a priori 2019 a todo el periodo de estudio

Una vez validada la arquitectura del acoplamiento, surge la interrogante metodológica respecto a la sensibilidad temporal del AMF. Específicamente, resulta imperativo evaluar si la variabilidad interanual de la atmósfera exige el uso de un perfil a priori dinámico (año a año) o si es admisible el uso de un perfil representativo estático para procesar series de tiempo prolongadas. Para este fin, se seleccionó el perfil CHIMERE del año 2019 como línea base climatológica, aplicándolo a las recuperaciones satelitales del resto de los años evaluados (archivos híbridos).

Al contrastar la climatología mensual generada utilizando el perfil a priori del año correspondiente (e.g., TROPOMI 2018 acoplado con CHIMERE 2018) frente a la configuración híbrida (e.g., TROPOMI 2018 acoplado con CHIMERE 2019), los resultados revelan que la magnitud de la columna troposférica recalculada es escasamente sensible a la varianza interanual de los campos químicos simulados.

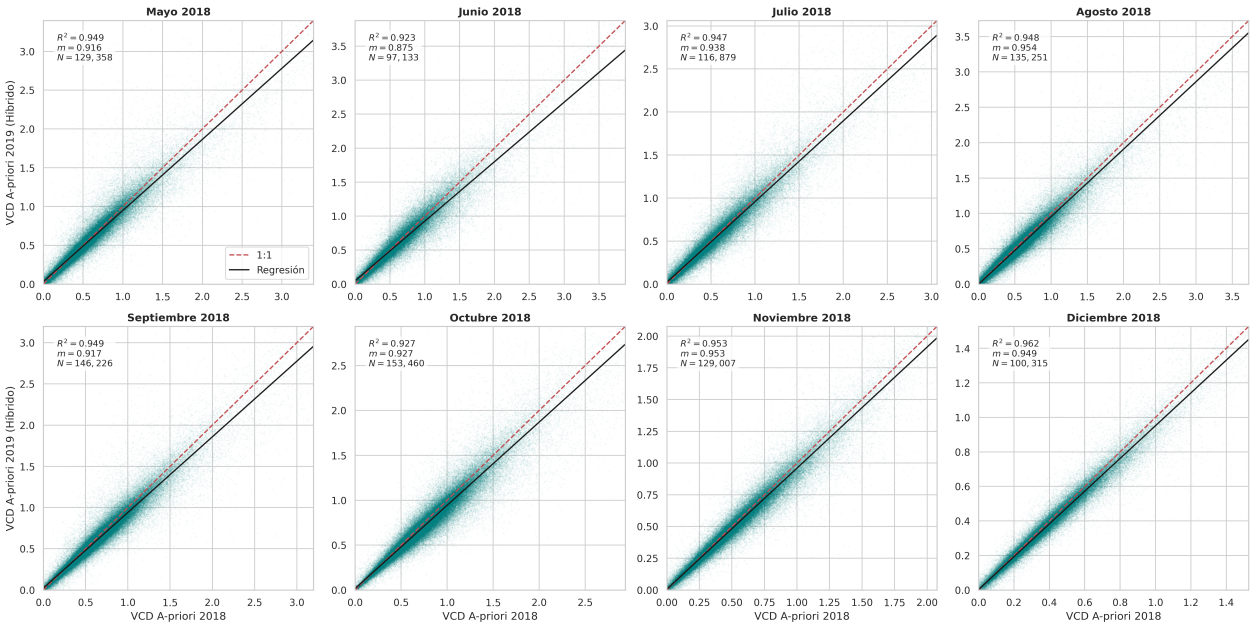


Figura 3.5: Gráficos de dispersión de las columnas troposféricas de NO_2 de TROPOMI para los meses disponibles del año 2018 modificadas usando simulaciones CHIMERE 2018 y CHIMERE 2019.

Tabla 3.1: Estadísticas de validación por mes.

Mes	R (Pearson)	R^2	Pendiente	Sesgo Medio
Mayo	0.9743	0.9494	0.9162	-1.1001×10^{-2}
Junio	0.9607	0.9230	0.8750	-3.1069×10^{-2}
Julio	0.9729	0.9466	0.9379	-1.0448×10^{-2}
Agosto	0.9737	0.9480	0.9544	-2.6644×10^{-2}
Septiembre	0.9742	0.9491	0.9174	-2.9635×10^{-2}
Octubre	0.9631	0.9275	0.9266	-3.9414×10^{-2}
Noviembre	0.9762	0.9529	0.9535	-1.8430×10^{-2}
Diciembre	0.9806	0.9615	0.9487	-1.8085×10^{-2}

Como se describe en los diagramas de dispersión mensuales de la Figura 3.5 y se consolida cuantitativamente en la Tabla 3.1, el ajuste lineal entre ambas configuraciones presenta un grado de ajuste estadístico sobresaliente. El coeficiente de correlación de Pearson (R) se mantiene por sobre el 0.960 de manera consistente en todos los periodos analizados, alcanzando su valor máximo en diciembre con un $R = 0.9806$, lo que implica que la variabilidad mutua explicada (R^2) oscila entre el 92.3% y el 96.1%. Asimismo, el sesgo medio absoluto permanece confinado en magnitudes marginales en el orden de -1.04×10^{-2} a -3.94×10^{-2} Pmolec/cm^2, evidenciando que la introducción del año base estático preserva la consistencia geométrica y la escala de la variable observada original.

Las pendientes de las curvas de regresión lineal, por su parte, se aproximan de forma simétrica a la unidad, variando entre 0.8750 (junio) y 0.9544 (agosto). El hecho de que las pendientes tiendan levemente a ser menores que 1 indica una mínima y sistemática amortiguación en las concentraciones urbanas más extremas, sin alterar en absoluto la estructura espacial del contaminante en el dominio. Este comportamiento se explica debido a que la forma relativa de la distribución vertical del NO_2 dentro de la baja troposfera en Chile central se encuentra condicionada principalmente por factores geográficos fijos y dinámicas meteorológicas persistentes de escala estacional, tales como el régimen de brisas valle-montaña, la estabilidad termodinámica por la subsidencia anticiclónica y la altura confinada de la capa límite planetaria, más que por las fluctuaciones marginales de la meteorología interanual entre periodos continuos. En consecuencia, aunque la magnitud absoluta de los flujos locales de emisión sufra variaciones temporales, el gradiente geométrico del gas traza preserva una homogeneidad estructural estricta.

Por lo tanto, los resultados confirman que el uso del perfil unificado del año 2019 introduce un error metodológico despreciable, situándose significativamente por debajo de la incertidumbre instrumental propia de las mediciones brutas del sensor TROPOMI (típicamente cifrada en torno al 20%–30% [Beirle et al., 2019]). Esto valida metodológicamente el empleo de una climatología de referencia unificada para procesar el periodo de estudio extendido, optimizando sustancialmente la carga de cómputo asociada al modelamiento regional sin vulnerar la integridad física de las densidades de columna. Con este paso se garantiza que cualquier tendencia analizada en las etapas posteriores mediante el algoritmo de inversión FDA responda

estrictamente a variaciones reales de las fuentes de emisión antropogénicas y superficiales, y no a artefactos numéricos introducidos por las oscilaciones interanuales del modelo de transporte químico base.

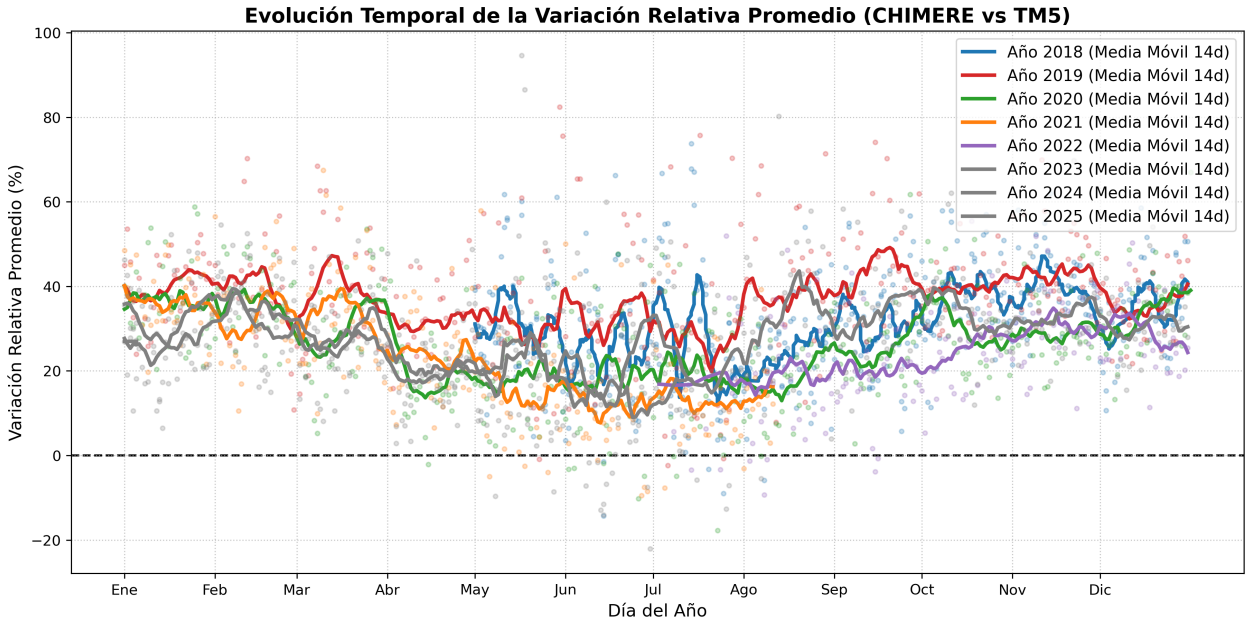


Figura 3.6: Evolución de la variación relativa promedio interanual al reemplazar el perfil a priori de la columna troposférica de NO2 original (modelo TM5-MP) con el de CHIMERE.

3.3. Parametrización de los términos físicos de la ecuación FDA

El núcleo analítico del modelo Top-Down se fundamenta en la ecuación de conservación de masa aplicada a la troposfera. Para que el algoritmo logre invertir la ecuación y cuantificar las emisiones superficiales (E) a partir de las densidades de columna observadas, es matemáticamente imperativo resolver tres componentes físicos fundamentales. En esta sección se aborda la parametrización de dichos términos: el cálculo del transporte espacial gobernado por la dinámica de los vientos superficiales proporcionados por el modelo WRF, la determinación del término de sumidero dictado por el tiempo de vida químico del contaminante (τ), y la aplicación del factor de escalamiento necesario para extrapolar las mediciones satelitales de NO_2 hacia las emisiones totales de NO_x atmosférico.

3.3.1. Dinámica estacional de los campos de viento y transporte espacial

El término de transporte horizontal en la ecuación FDA está intrínsecamente ligado a la variabilidad de la altura de la capa límite planetaria y a la interacción entre los sistemas de circulación de escala sinóptica y mesoescala local. La Figura 3.7 ilustra los campos de viento superficiales promedio promediados verticalmente dentro de la PBL para dos meses contrastantes del año 2019.

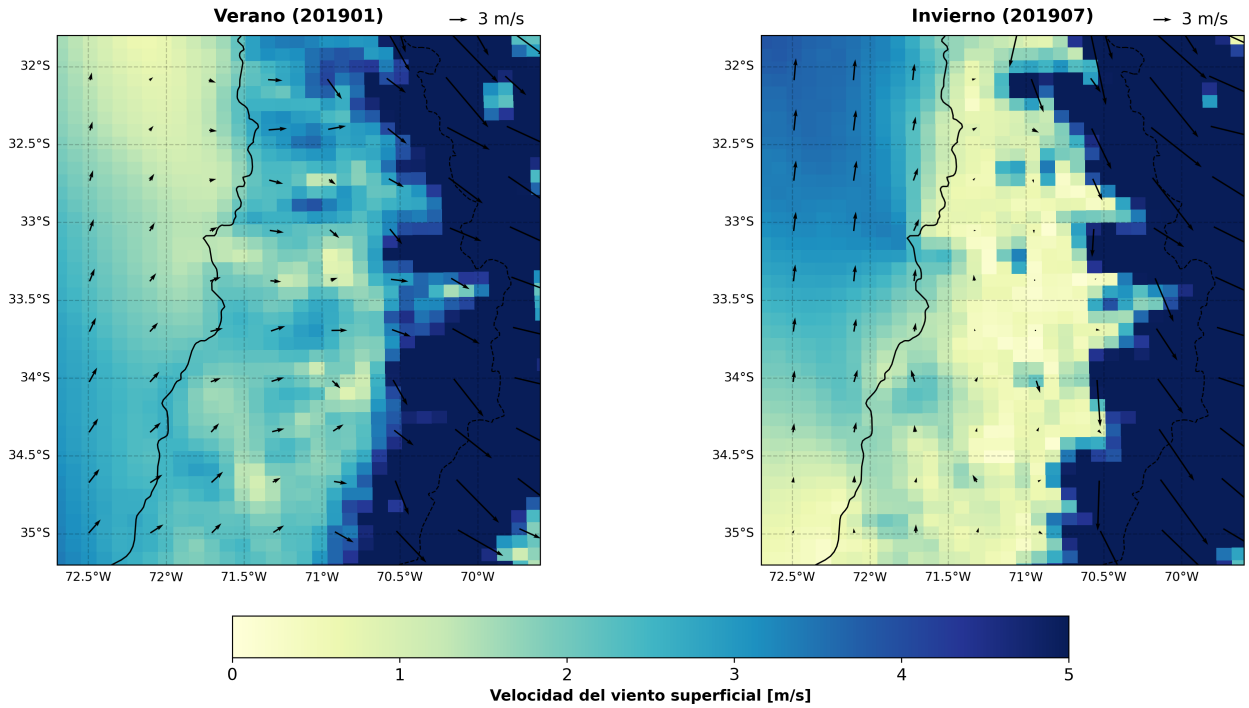


Figura 3.7: Campos de viento promediados verticalmente dentro de la PBL para dos meses contrastantes del año 2019: enero, como representante del período estival, y julio, como representante del período invernal.

Durante el verano austral (enero), la dinámica atmosférica está dominada por la persistencia y posición austral del Anticiclón del Pacífico Sudeste, lo que intensifica la gradiente de presión baroclínica entre el océano y el continente. Esto se traduce en una fuerte y regular incursión diurna de vientos costeros y brisas de valle (suroeste/oeste), que penetran con magnitudes promedio de 3.0 a 5.0 m/s hacia las cuencas interiores de la Región Metropolitana y de Valparaíso. Esta marcada ventilación diurna ejerce un forzamiento cinemático sustancial sobre la pluma de contaminantes, incrementando el peso relativo del término de advección neta y divergencia de flujo ($\nabla \cdot \mathbf{F}$) en la ecuación conservativa. Físicamente, este escenario estival implica que una fracción considerable del NO_2 medido por TROPOMI ha sido desplazada horizontalmente fuera de sus celdas de emisión originales antes de experimentar procesos de remoción química.

Por el contrario, el escenario invernal (julio) exhibe un cambio drástico en los patrones de circulación. La frecuencia de sistemas de alta presión fría favorece el desarrollo de intensas inversiones térmicas de subsidencia y vientos superficiales de magnitudes considerablemente menores, predominando flujos anémicos e inferiores a los 1.5 o 2.0 m/s. Geográficamente, la compleja topografía de Chile Central —delimitada por la Cordillera de la Costa y la Cordillera de los Andes— actúa como una barrera física tridimensional que estanca las masas de aire dentro de la cuenca de Santiago y los valles adyacentes del río Aconcagua. En consecuencia, durante el invierno, el término de transporte cinemático reduce su dominancia en la ecuación FDA, minimizando la advección horizontal y propiciando que la señal de columna detectada por el satélite

permanezca espacialmente confinada sobre sus fuentes antropogénicas basales.

3.3.2. Variabilidad espacio-temporal del tiempo de vida químico

El término de sumidero químico representa la tasa de remoción neta de la familia de los NO_x en la troposfera, un proceso fotoquímico gobernado por el tiempo de vida local del contaminante (τ). Las Figuras 3.8 y 3.9 evidencian el agudo ciclo estacional y la marcada heterogeneidad espacial que experimenta esta variable sobre el dominio de estudio.

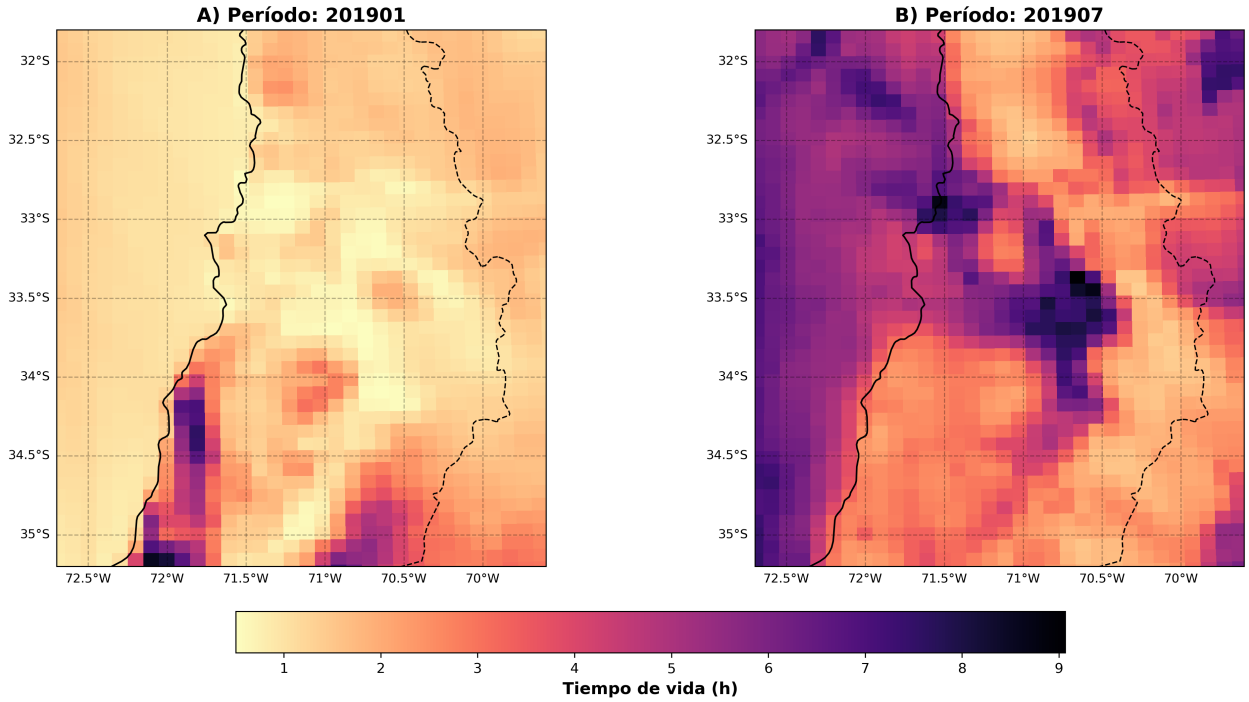


Figura 3.8: Tiempo de vida medio promediado verticalmente dentro de la PBL para dos meses contrastantes del año 2019: A) enero, como representante del período estival; y B) julio, como representante del período invernal.

En el período estival (enero), la distribución espacial de τ (Figura 3.8, izquierda) muestra un colapso generalizado en el tiempo de residencia del gas, registrando valores que oscilan estrictamente entre 1.5 – 3.0 horas. Este fenómeno se explica por la máxima insolación diurna y las altas temperaturas, condiciones fotoquímicas óptimas que catalizan la producción masiva del radical hidroxilo OH a través de la fotólisis del ozono troposférico. Dado que la vía principal de remoción diurna del NO_2 es su reacción homogénea en fase gaseosa con el OH para formar ácido nítrico (HNO_3), la hiperactividad del radical en enero acelera el decaimiento de la masa molecular. El análisis distributivo anual mediante gráficos de caja (Figura 3.9) ratifica este comportamiento veraniego, mostrando una distribución espacial sumamente homogénea y compacta (baja varianza inter-celda) centrada en el límite inferior de la escala temporal.

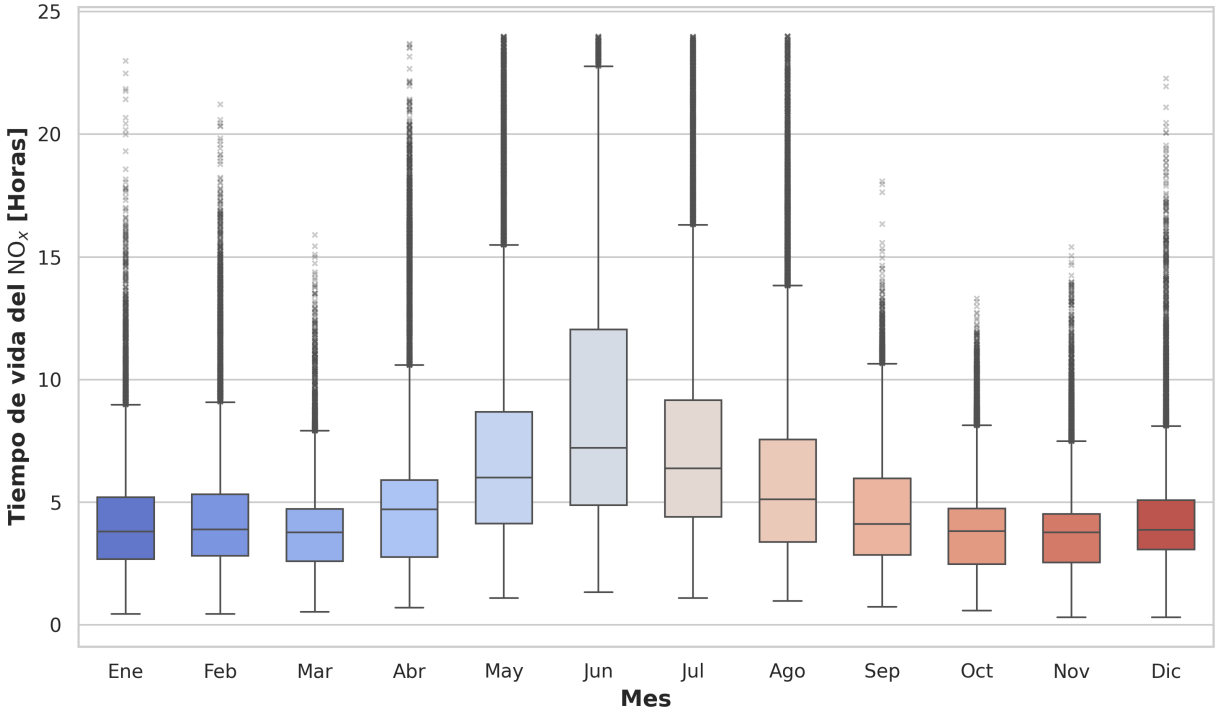


Figura 3.9: Variabilidad mensual del tiempo de vida químico τ del NO_x en horas durante el año 2019.

En agudo contraste, durante el invierno (julio), la reducción en el ángulo de incidencia solar y el acortamiento de la jornada diurna inhiben significativamente la actividad fotolítica. Bajo estas condiciones restrictivas de radiación, la concentración de radicales OH decrece en órdenes de magnitud, provocando una prolongación sistemática de τ, la cual se expande hacia un rango de 5.0 a 9.0 horas sobre los valles interiores y las zonas urbanas de alta densidad. Como se observa en la distribución de julio en la Figura 3.9, el perfil invernal no solo eleva significativamente su mediana, sino que incrementa drásticamente su dispersión espacial y presenta valores atípicos (*outliers*) superiores a las 12 horas en zonas cordilleranas y rurales periféricas. Esta ventana de supervivencia extendida permite que el contaminante persista en la atmósfera por períodos prolongados, haciendo indispensable que el modelo FDA resuelva con alta precisión matemática el transporte dinámico invernal —a pesar de la debilidad de sus vientos— para evitar sesgos por acumulación artificial de masa química en la inversión.

3.3.3. Comportamiento del factor de partición

Debido a que el sensor TROPOMI recupera de forma exclusiva la densidad de columna vertical de la fracción de dióxido de nitrógeno, es matemáticamente mandatorio aplicar un factor de escalamiento continuo para aproximar las emisiones superficiales expresadas en términos de NO_x total (NO_x = NO + NO_2). Este acoplamiento se resuelve mediante el factor adimensional L, cuya variabilidad geográfica estacional se expone en la Figura 3.10.

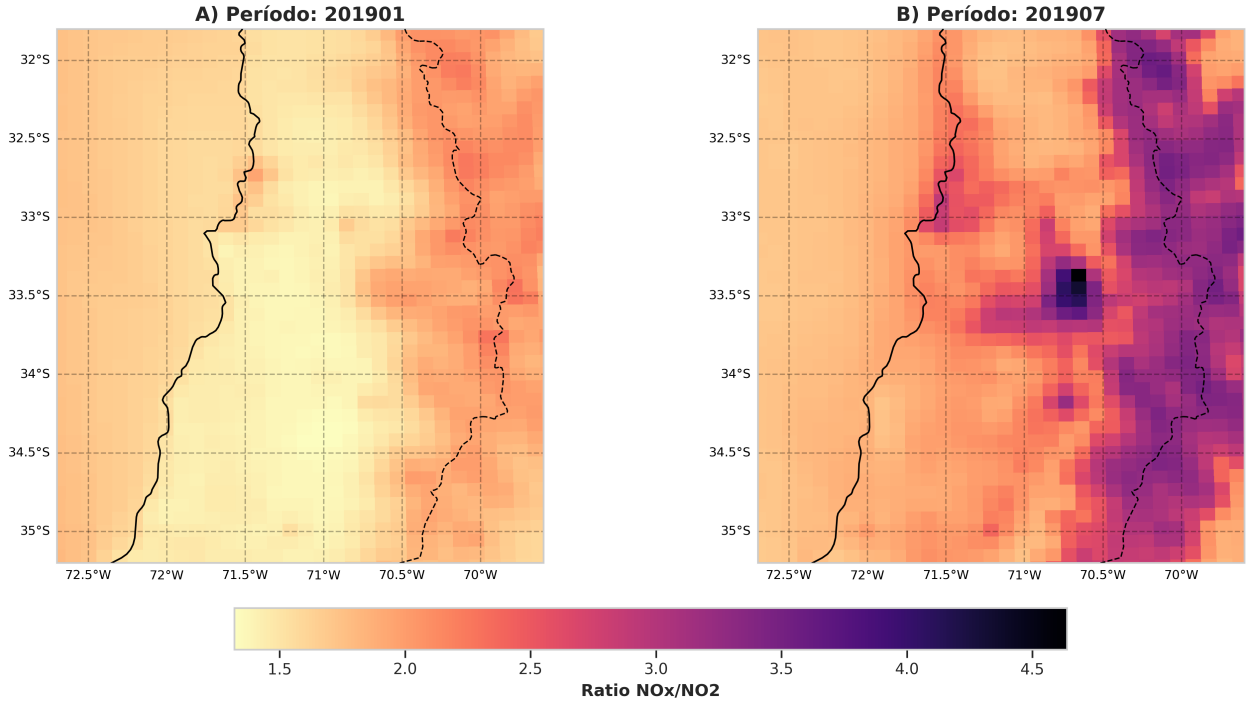


Figura 3.10: Factor de partición promediado verticalmente dentro de la PBL para dos meses contrastantes del año 2019: A) enero, como representante del período estival; y B) julio, como representante del período invernal.

Los resultados del modelo demuestran que el parámetro L exhibe una notable estabilidad geométrica sobre la mayor parte del territorio rural y de fondo regional, manteniéndose confinado en un estrecho rango de 1.22 a 1.32. Esta condición base comprueba que, a la hora del sobrepaso solar del satélite TROPOMI (~14:00 Hora Local), el NO_2 representa de manera sistemática entre el 75% y el 82% de la concentración total de la familia de óxidos de nitrógeno bajo condiciones de equilibrio fotostático diurno.

No obstante, el mapa espacial de la Figura 3.10 revela perturbaciones de microescala de alto interés científico en los núcleos urbanos densos. Sobre el eje céntrico de la Región Metropolitana y las zonas de alta densidad vial de Valparaíso, el factor L experimenta un incremento localizado que rompe el gradiente regional, alcanzando cotas de 1.35 a 1.42. Este incremento localizado responde a la inyección masiva e ininterrumpida de emisiones frescas de monóxido de nitrógeno provenientes del parque automotriz y fuentes industriales basales. Al interactuar con el régimen químico local saturado de compuestos orgánicos volátiles (VOCs) y bajo la continua titulación fotoquímica del ozono, la relación termodinámica se desplaza temporalmente, aumentando la fracción de NO disponible en la celda. El uso de una climatología de factores L derivados dinámicamente de CHIMERE a escala horaria, en lugar de un factor estático espacial extraído de la literatura, dota a la inversión FDA de una robustez crítica para evitar la subestimación de las emisiones de NO_x en áreas metropolitanas densamente pobladas.

Tabla 3.2: Comparación de los parámetros físicos estimados en este estudio (Chile Central) con valores de referencia reportados en la literatura científica para latitudes medias.

Parámetro Físico	Condición	Este Estudio	Literatura Global
Tiempo de vida (τ)	Verano (Alta radiación)	1.5 – 3.0 h	2.0 – 4.0 h[a]
	Invierno (Baja radiación)	5.0 – 9.0 h	6.0 – 12.0 h[c]
Factor de Partición (L)	Zonas de Fondo / Rurales	1.22 – 1.30	1.25 – 1.32[c,d]
	Zonas Urbanas Saturadas	1.35 – 1.42	1.32 – 1.45[c,d]

[a] [Beirle et al., 2011]; [b] [Laughner and Cohen, 2019]; [c] [Beirle et al., 2019]; [d] [Lorente et al., 2019];

3.3.4. Impacto integrado de la parametrización en el modelo FDA

La integración matemática de los parámetros físicos, meteorológicos y químicos descritos en las subsecciones previas permite la resolución explícita y analítica de la ecuación de balance de masa en celdas regulares. La Figura 3.11 desglosa el comportamiento de los términos que componen el algoritmo FDA para el escenario estival de enero de 2019, permitiendo evaluar de forma aislada la ponderación matemática del sumidero y el transporte.

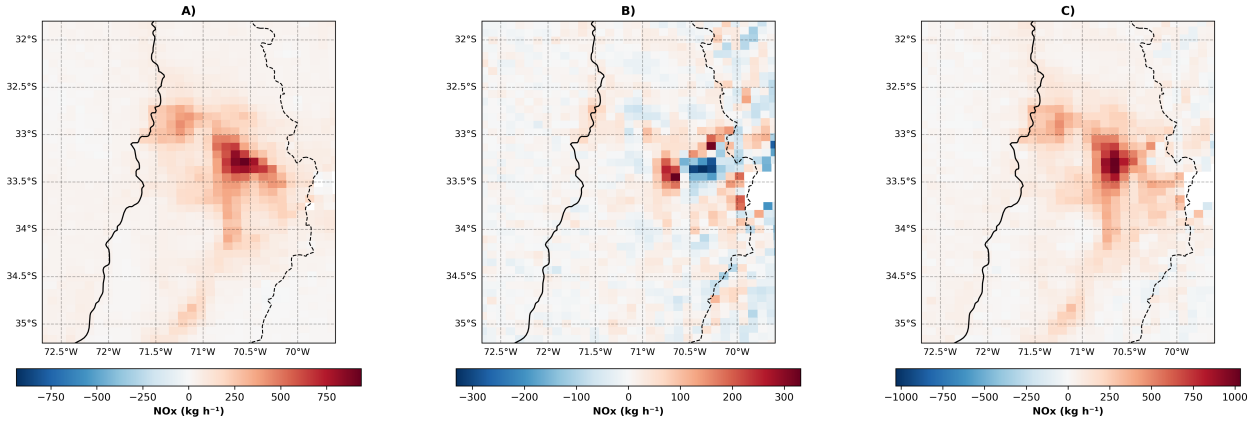


Figura 3.11: Promedio mensual de las emisiones de NO_x en $kg \cdot h^{-1}$ estimadas mediante FDA-TROPOMI proyectadas en la grilla de CHIMERE $9 \times 9 km^2$, en Chile Central para enero de 2019. A) Término de sumidero; B) Término de transporte o divergencia; y C) Emisiones totales de NO_x.

Al inspeccionar el panel A, se constata que el decaimiento químico actúa como la fuerza motriz y la huella estructural del inventario. Su distribución es estrictamente positiva y delinea con alta fidelidad los centros de actividad antrópica, tales como los polos industriales, termoeléctricos y los principales corredores viales urbanos de las regiones estudiadas.

Por su parte, el panel B asume el rol de corrector morfológico de la inversión espacial. Este término exhibe un patrón dipolar característico y altamente contrastante, alternando entre tasas de divergencia netamente

positivas (tonalidades rojas) y tasas de convergencia netamente negativas (tonalidades azules). Los núcleos divergentes se posicionan de manera adyacente a las fuentes intensas, indicando el punto geográfico exacto donde la velocidad del viento arrastra la masa gaseosa hacia afuera de la celda de origen. Inversamente, los núcleos convergentes mapean las celdas receptoras aguas abajo, donde el flujo se desacelera o cambia de dirección debido a las barreras topográficas, acumulando dinámicamente el contaminante. Es este acoplamiento diferencial el que permite que el modelo FDA reasigne la masa desplazada por la pluma hacia su verdadera coordenada superficial de origen, neutralizando matemáticamente el efecto de dispersión atmosférica que típicamente deforma y sobreestima el radio de influencia de las fuentes en las observaciones satelitales crudas.

Finalmente, el Panel C representa el vector final invertido Top-Down (E), el cual opera como la suma geométrica estricta del término de sumidero y el término de transporte espacial. Este resultado consolida la corrección, evidenciando núcleos de emisión más compactos, de mayor magnitud local y espacialmente coherentes con la morfología urbana y productiva del dominio.

3.4. Resultados del modelo: Inventario de emisiones Top-Down espacio-temporal

Tras acoplar las observaciones satelitales, resolver paramétricamente la ecuación de divergencia y validar la sensibilidad del instrumento frente a sus condiciones de frontera, se obtiene el producto final del modelamiento estadístico-físico. Esta sección expone la distribución espacio-temporal de las emisiones de NO_x estimadas mediante el enfoque Top-Down. A través del despliegue cartográfico y la agregación de las matrices resultantes, se presenta la radiografía consolidada de las emisiones en la zona centro de Chile, permitiendo identificar espacialmente la influencia de fuentes puntuales, grandes matrices urbanas y principales ejes de conectividad vehicular capturados por TROPOMI.

3.4.1. Análisis de los patrones espaciales y localización de hotspots

La resolución analítica de la ecuación de Divergencia de Flujo (FDA) integrada temporalmente proporciona una representación directa y cuantitativa de las tasas de emisión superficiales en el dominio de Chile Central. A diferencia de las densidades de columna vertical (VCD) crudas medidas por TROPOMI, las cuales exhiben estructuras elípticas difusas producto del transporte pasivo del gas, el mapa de emisiones netas invertido bajo el enfoque Top-Down (Figura 3.12) logra una notable compactación geométrica de las plumas de contaminación, reasignando la masa molecular hacia sus verdaderas coordenadas de origen superficial.

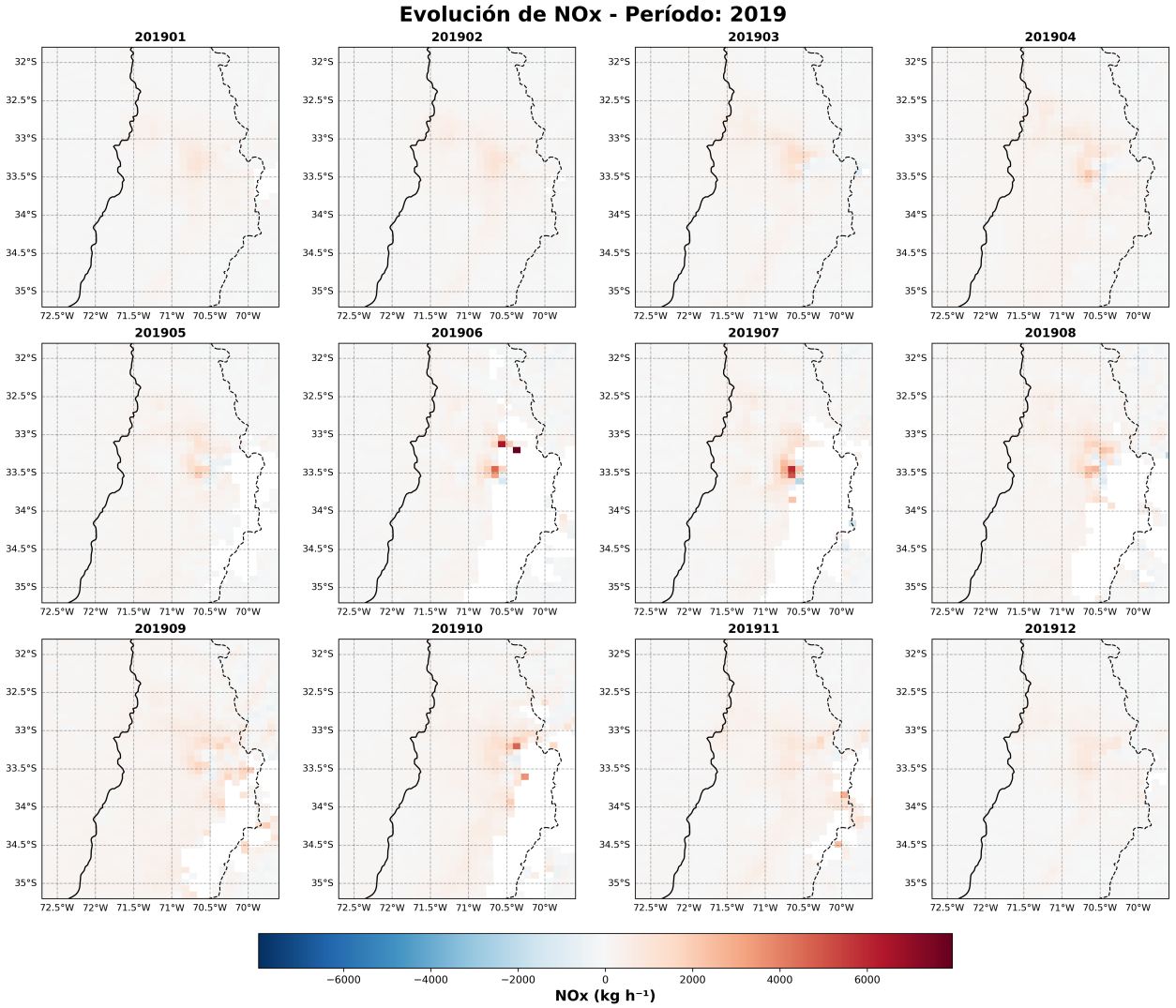


Figura 3.12: Promedio mensual de las emisiones de NO_x estimadas mediante FDA a partir de la columna troposférica de NO_2 de TROPOMI proyectadas en la grilla de CHIMERE 9x9 km2, en Chile central para el año 2019 completo.

El análisis espacial del inventario consolidado revela que la distribución del NO_x se encuentra estrictamente condicionada por la geografía económica y los ejes de conectividad regional. La Región Metropolitana de Santiago se consolida como el principal núcleo emisor difuso del dominio, delimitando un área de alta intensidad continua que abraza la morfología de la Depresión Intermedia. El algoritmo FDA captura con alta fidelidad el decaimiento de las emisiones hacia la periferia rural de la cuenca, aislando de forma nítida la señal del conglomerado urbano central.

Fuera de la matriz metropolitana, el modelo Top-Down demuestra una sensibilidad sobresaliente para discriminar fuentes puntuales agudas de escala industrial. En la franja costera de la Región de Valparaíso, destaca el complejo industrial y termoeléctrico de Quintero-Puchuncaví como un *hotspot* aislado de magni-

tudes comparables a los píxeles más densos de la capital, lo que constata el peso relativo de las combustiones estacionarias de gran envergadura dentro del inventario nacional. Asimismo, el modelo delinea con precisión la actividad logística y portuaria del Gran Valparaíso y San Antonio. Hacia el sur del dominio, la traza lineal de las emisiones sigue de manera sistemática el eje de la Ruta 5 Sur, capturando el forzamiento vehicular continuo del principal corredor de transporte terrestre de la zona central, el cual interconecta los núcleos urbanos secundarios de Rancagua y San Fernando.

3.4.2. Evaluación de la variabilidad estacional y estabilidad de la inversión

El contraste intermensual expuesto evidencia la profunda interacción entre los ciclos de actividad antropogénica y las condiciones límite impuestas por la meteorología y la fotoquímica local. Al evaluar la variabilidad estacional del inventario entre el período estival (representado por enero) y el mes invernal de julio, se manifiesta un patrón de amplificación térmica y cinemática inverso sobre las tasas de emisión estimadas.

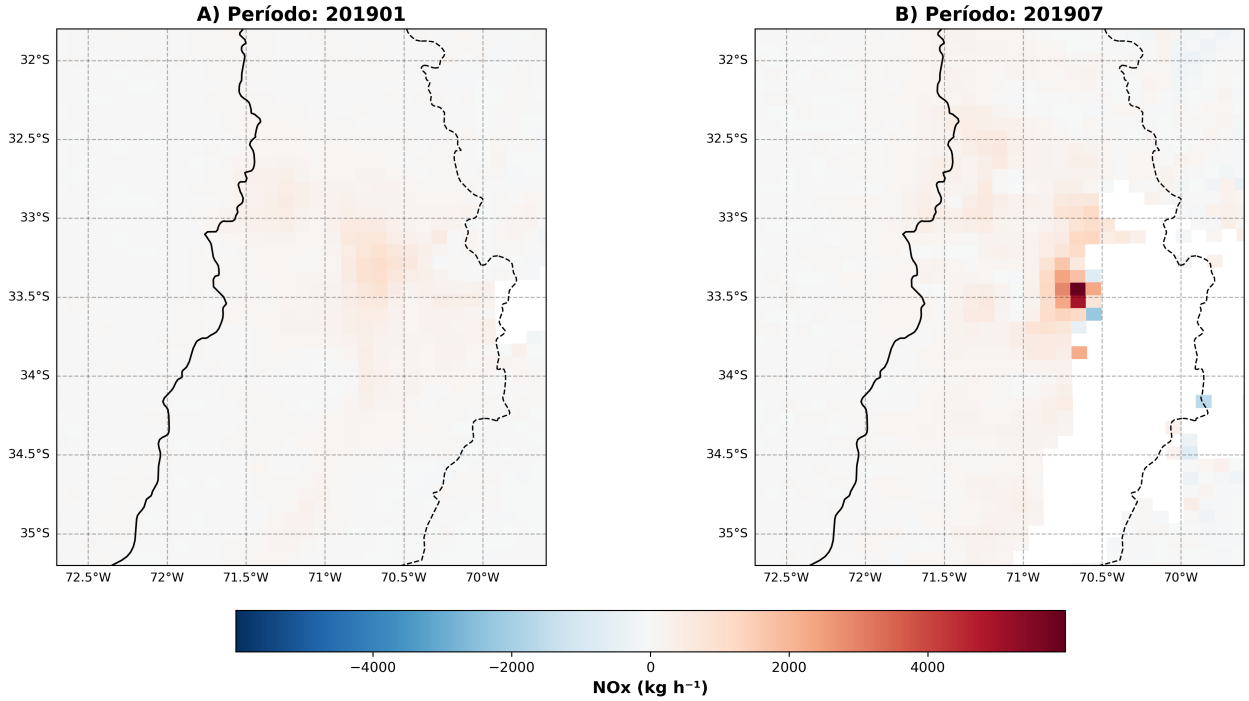


Figura 3.13: Contraste entre los promedios mensuales de las emisiones estimadas en Chile central para los meses de A) enero, y B) julio.

Durante el verano, la rápida remoción del contaminante dictada por un tiempo de vida fotoquímico reducido ($\tau \approx 2$ horas) provoca que el término de sumidero químico domine la masa de la ecuación. No obstante, la presencia de vientos intensos provenientes de la capa límite (típicamente en el orden de los 5 m/s) exige que el término de transporte horizontal opere como un corrector crítico, evitando que la pluma advectada

distorsione la localización superficial de las fuentes.

Por el contrario, en el período invernal, el estancamiento cinemático orográfico inducido por vientos se combina con la baja radiación solar, extendiendo el tiempo de residencia del gas en la baja tropósfera ($\tau \approx 7$ horas). Bajo este escenario restrictivo, el modelo FDA revela un incremento neto en las emisiones de áreas metropolitanas densas, como Santiago y Rancagua. Este fenómeno responde a dos factores físicos concurrentes: primero, el forzamiento real provocado por fuentes estacionales adicionales (calefacción residencial mediante combustión de biomasa y el aumento en el encendido de motores en frío); y segundo, la persistencia de masas de aire ricas en NO fresco que desplazan el equilibrio fotostático (elevando el factor de partición L), fenómeno que es integrado analíticamente por la topología del modelo.

Sin embargo, la interpretación de la magnitud de estos máximos invernales exige considerar las limitaciones observacionales inherentes a la espectrometría satelital. Durante los meses de invierno, la alta frecuencia de sistemas frontales y nubosidad en Chile Central induce una pérdida sistemática de datos debido al estricto filtro de calidad exigido para asimilar la columna troposférica ($qa\_value > 0.75$).

En consecuencia, la estimación del mes de julio acarrea un sesgo determinista de "cielo despejado y vientos calmos". Esto implica que la matriz top-down no representa un promedio continuo absoluto de los 31 días del mes, sino una submuestra representativa de los días con mayor estabilidad atmosférica. Desde una perspectiva de política pública, aunque esta pérdida de datos disminuye la densidad temporal del inventario, otorga al modelo la capacidad de capturar y promediar con alta fidelidad precisamente los episodios críticos de acumulación (preemergencias y emergencias ambientales), que son los de mayor interés para la gestión de la calidad del aire en valles encajonados.

3.4.3. Disponibilidad de datos y reproducibilidad del inventario

La base de datos completa derivada de esta investigación ha sido indexada en un repositorio público especializado.

El inventario Top-Down consolidado, con los campos de emisión diarios a escala de órbita nativa (*swath*) como las grillas regulares interpoladas de los promedios mensuales en formato NetCDF4 estructurado, se encuentra disponible para su consulta, descarga y auditoría científica en el repositorio oficial de GitHub del proyecto, accesible a través del siguiente enlace permanente: https://github.com/marcos-pereira-2001/Modelo-FDA-para-estimar-emisiones-de-NOx-mediante-VCD-de-TROPOMI.git. Este registro digital incorpora adicionalmente los scripts de procesamiento por lotes, los algoritmos de acoplamiento de perfiles verticales a priori y los operadores diferenciales de divergencia esférica desarrollados, asegurando la transparencia metodológica del flujo de datos.

3.5. Síntesis

En síntesis, el desarrollo expuesto en este capítulo materializó la construcción matemática y fenomenológica del inventario *Top-Down* de NO_x para Chile Central. El flujo de geoprocesamiento superó con éxito las limitaciones topológicas de los productos satelitales estándar al conservar la matriz nativa de observación (*swath*), neutralizando la distorsión espacial del efecto *bow-tie*. Simultáneamente, el reemplazo del perfil *a priori* global por simulaciones regionales de alta resolución (CHIMERE) corrigió el sesgo de subestimación instrumental sobre los polos urbanos densos. La validación interanual de esta corrección radiativa demostró una notable estabilidad temporal, permitiendo optimizar el costo computacional del modelo sin comprometer la integridad geométrica de la señal.

Sobre esta base observacional refinada, la resolución paramétrica de la ecuación de Divergencia de Flujo (FDA) logró acoplar la dinámica estacional de la atmósfera regional. El modelo representó fielmente la dualidad del transporte de masa: transitando desde un escenario estival dominado por fuertes forzamientos advectivos y un decaimiento fotoquímico acelerado por la hiperactividad del radical OH, hacia un régimen invernal caracterizado por el estancamiento cinemático y una prolongada supervivencia del gas. Gracias a este acoplamiento diferencial, el término de transporte operó como un riguroso corrector morfológico, reasignando la masa desplazada por las plumas hacia sus verdaderas coordenadas superficiales.

Como resultado, el mapeo espacial del inventario logró aislar y focalizar la huella de las fuentes antropogénicas con alta fidelidad, delineando la conurbación metropolitana, el cordón industrial de Quintero-Puchuncaví, los complejos portuarios y el corredor vial de la Ruta 5 Sur. Aunque la matriz de resultados invernales incorpora el sesgo de "cielo despejado" propio de la teledetección óptica, el inventario representa con precisión los episodios de mayor estabilidad atmosférica y acumulación urbana.

Finalmente, la consolidación de estos resultados —y la apertura metodológica mediante repositorios públicos auditables— asienta el sustento físico y espacial requerido para transitar hacia el siguiente capítulo, donde se abordará la intercomparación empírica y multiescala del modelo satelital frente al inventario oficial *Bottom-Up* (INEMA).

Capítulo 4

Intercomparación, análisis de variabilidad y propagación de errores

Este capítulo se centra en la evaluación crítica y validación del inventario Top-Down generado por el modelo de Divergencia de Flujo (FDA) acoplado a las observaciones de TROPOMI. Tras haber establecido la distribución de las emisiones en el capítulo anterior, el análisis transita ahora hacia la cuantificación de discrepancias y la delimitación de la incertidumbre. Para lograrlo, el desempeño del modelo se aborda desde tres dimensiones analíticas complementarias, cada una con su propia escala espacial y temporal: en primer lugar, se ejecuta una intercomparación espacial de base anual frente al inventario oficial Bottom-Up (INEMA); en segundo lugar, se evalúa la dinámica temporal en locaciones puntuales contrastantes; y finalmente, se desarrolla un análisis de propagación de errores a nivel de grilla completa.

4.1. Intercomparación de inventarios

El análisis comparativo entre las estimaciones Top-Down derivadas mediante Divergencia de Flujo (FDA) y los registros ascendentes del inventario INEMA constituye el núcleo de validación de este estudio. Para asegurar la coherencia dimensional y evitar sesgos metodológicos asociados a la distorsión del relieve y transporte sub-grilla, ambas bases de datos se consolidaron sobre una escala de masa anual expresada en gigagramos por año (Gg/año). Físicamente, esta intercomparación permite evaluar la capacidad del sensor óptico espacial TROPOMI para constatar de forma empírica la distribución espacial de las fuentes de emisión previamente mapeadas por métodos contables tradicionales. Adicionalmente, se muestran los resultados obtenidos aplicando el modelo de caja simplificado de FDA a modo de comparación.

4.1.1. Evaluación del dominio de estudio

Al analizar la escala comunal (Tablas 4.1 a 4.4), sobresale una divergencia dramática en comunas de gran extensión territorial y topografía cordillerana, tales como San José de Maipo (47.50 Gg/año en FDA vs. 0.20 Gg/año en INEMA) y Colina (38.47 Gg/año vs. 0.93 Gg/año). Esta discrepancia no debe interpretarse como una omisión masiva de fuentes contables por parte de INEMA, sino como un artefacto espacial del acoplamiento entre la geometría comunal y la resolución de la grilla satelital ($9 \times 9\,\mathrm{km}^2$). Al sumar el flujo másico sobre polígonos comunales extensos que abarcan cuencas de alta montaña, el algoritmo de intersección espacial asimila celdas periféricas que contienen la pluma de contaminantes advectada desde el núcleo urbano de Santiago. Por el contrario, en comunas urbanas pequeñas de la depresión intermedia (Tablas 4.2 y 4.4), la concordancia en magnitud es significativamente superior, demostrando que la divergencia se estabiliza cuando el área de control coincide con el radio de la fuente.

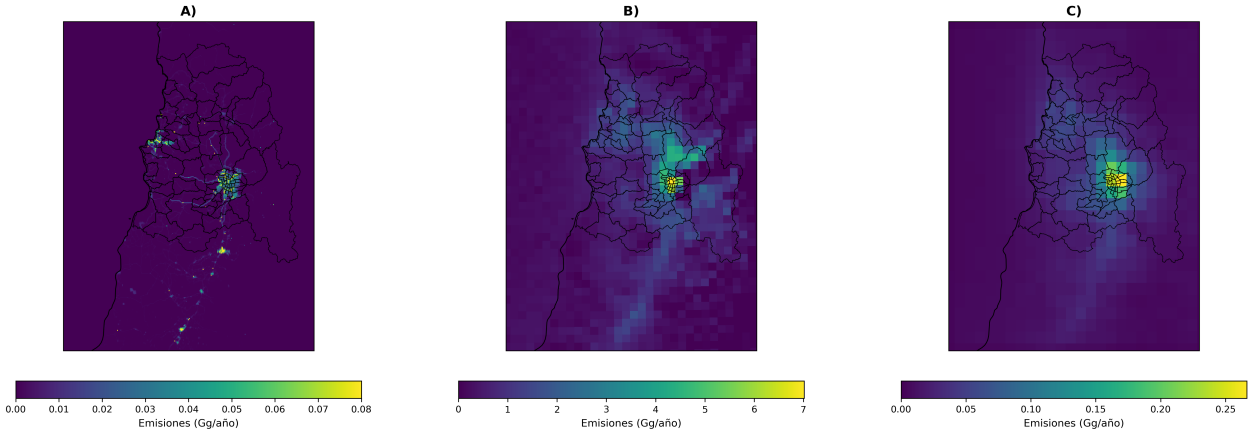


Figura 4.1: Emisiones anuales de NO_x en Chile Central en 2019. A) inventario INEMA, B) inventario FDA, C) modelo de caja simplificado.

4.1.2. Evaluación a escala comunal: Región Metropolitana y Región de Valparaíso

La brecha sistemática entre la estimación Top-Down (FDA) y el inventario Bottom-Up (INEMA) refleja las diferencias conceptuales entre un balance de masa físico y un conteo contable estático. Mientras INEMA calcula emisiones a partir de factores de emisión teóricos y kilometrajes promedio recorridos, el modelo FDA invierte la columna atmosférica real integrada. INEMA tiende a subestimar el presupuesto total de NO_x al no capturar adecuadamente el deterioro en la eficiencia de combustión del parque automotriz envejecido, las emisiones por encendido en frío y los patrones de congestión vehicular severa en los corredores metropolitanos. Sin embargo, el modelo satelital también introduce un sesgo al extrapolar la tasa horaria de las 14:00 horas mediante un Factor de Expansión Diaria (FED) espacialmente uniforme, el cual asume que todas las celdas del dominio siguen la misma curva de tráfico urbano.

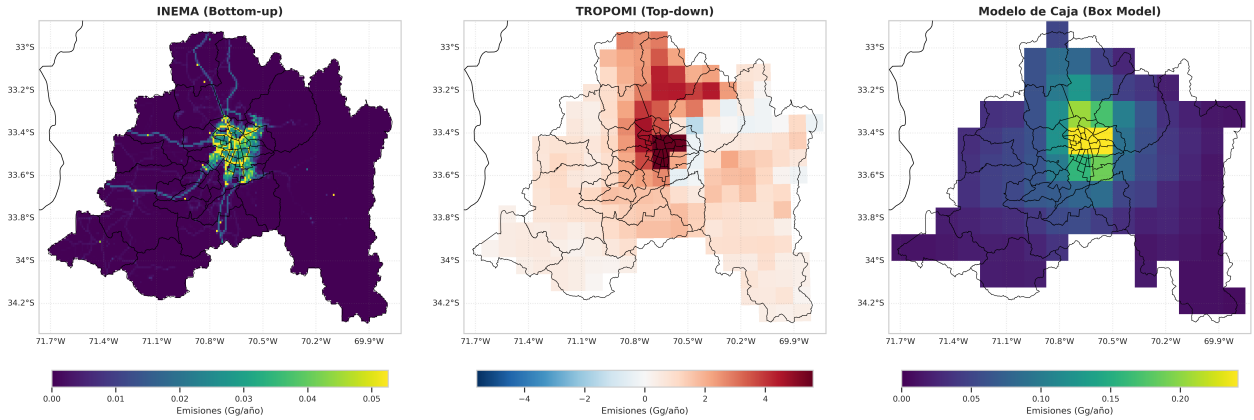


Figura 4.2: Emisiones anuales de NO_x en la Región Metropolitana en 2019. A) inventario INEMA, B) inventario FDA, C) modelo de caja simplificado.

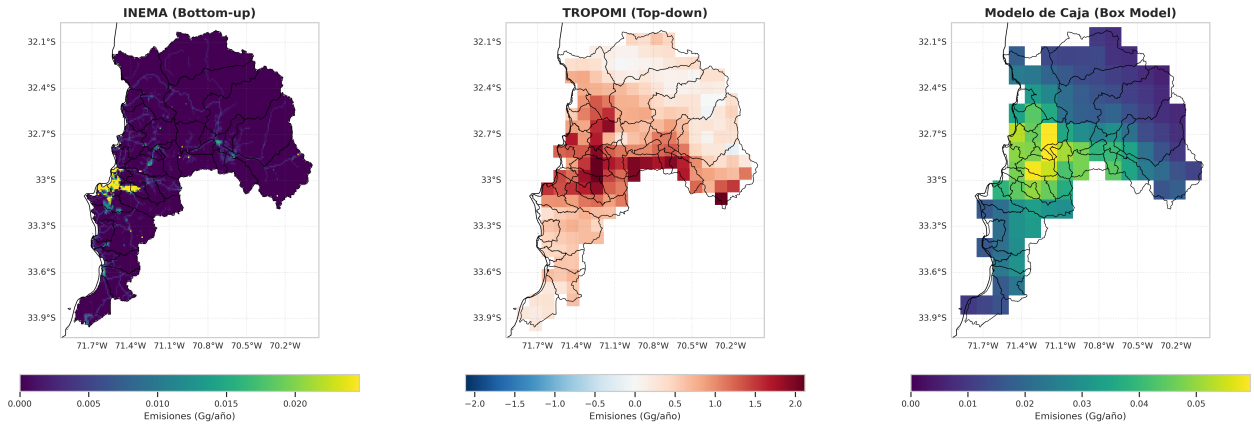


Figura 4.3: Emisiones anuales de NO_x en la Región de Valparaíso en 2019. A) inventario INEMA, B) inventario FDA, C) modelo de caja simplificado.

Como ejercicio exploratorio orientado a evaluar la sensibilidad del Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA)

frente a las anomalías de la señal satelital, se realizó una comparación entre la VCD de TROPOMI con la columna simulada de CHIMERE sin añadir el AK de TROPOMI. Trabajos previos han evidenciado que la VCD de TROPOMI presenta una sobreestimación sistemática durante los meses de invierno, impulsada por la acumulación del contaminante bajo nubes y el confinamiento termodinámico de la capa límite.

Esta distorsión se observa claramente en la serie temporal de la figura 4.4, donde la señal original de TROPOMI (línea roja) exhibe peaks invernales que superan recurrentemente los 1.0 Pmolec/cm^2. En base a esta comparación, se realizó un factor de ajuste mensual (linea morada) que restringe las magnitudes de TROPOMI a valores similares a CHIMERE (línea azul) pero manteniendo su variación a lo largo del año. Al aplicar el factor restrictivo α, se obtiene una señal satelital corregida (línea verde) que atenúa los valores extremos. Metodológicamente, este procedimiento fuerza a la columna de TROPOMI a converger hacia el comportamiento termodinámico basal dictado por la simulación pura de CHIMERE, estabilizando la entrada de datos previa a la aplicación del operador derivativo.

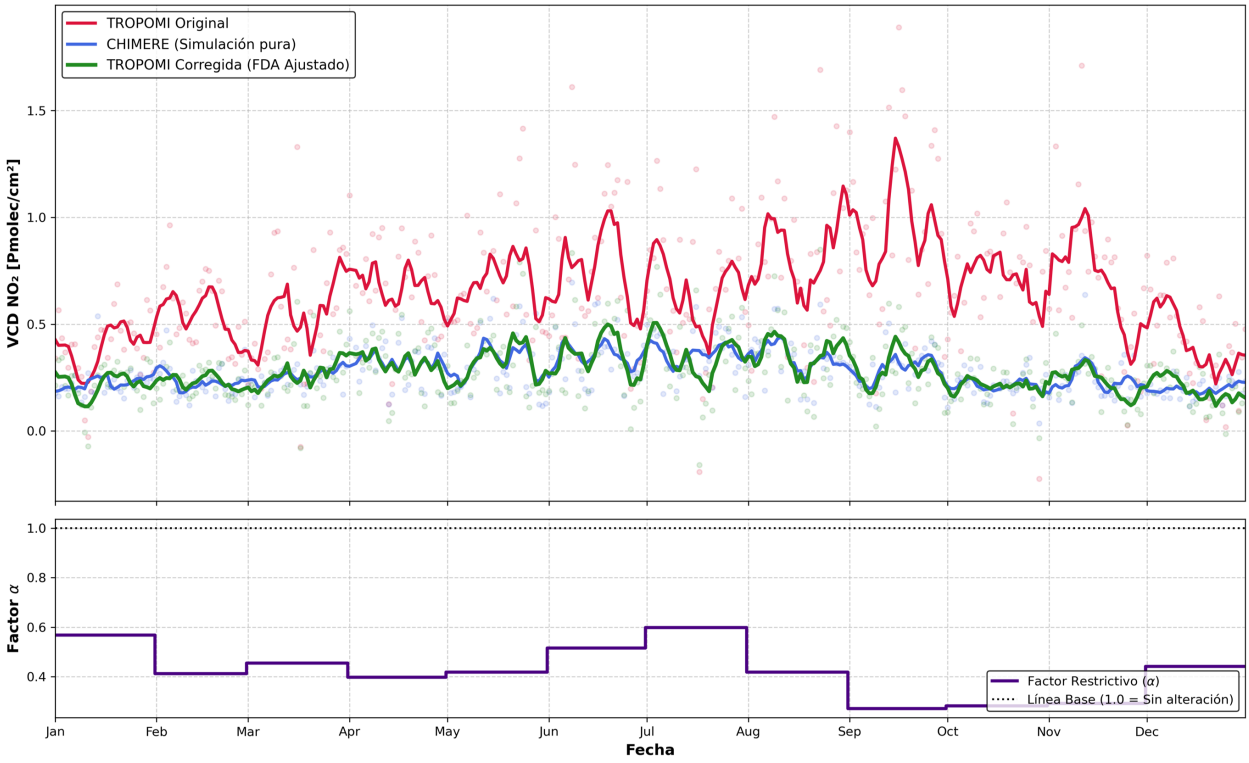


Figura 4.4: Aplicación de un factor de ajuste en la columna troposférica de NO2 de TROPOMI para el año 2019. En rojo se muestra la columna original de TROPOMI, en azul la columna simulada de CHIMERE y en verde la columna corregida de TROPOMI.

La propagación de esta corrección hacia el cálculo final de emisiones revela el peso cuantitativo del sesgo de TROPOMI. Al analizar las agregaciones anuales 4.5, se constata que las estimaciones del modelo Top-Down original (TROPOMI) superan masivamente a la línea base Bottom-Up (INEMA). Por ejemplo, en la Región

Metropolitana durante 2019, la estimación cruda fue de 332.1 Gg/año, mientras que INEMA reportó apenas 43.9 Gg/año. Al introducir el factor α ("TROPOMI ajustado"), las emisiones estimadas para dicho año caen a 132.9 Gg/año, lo que representa una contracción numérica cercana al 60% de la masa original. Una respuesta proporcional se observa en la Región de Valparaíso, donde la estimación del año 2019 se reduce de 210.0 Gg/año a 84.0 Gg/año tras el ajuste, acercándose a los 23.4 Gg/año estipulados por el inventario oficial. Estos resultados confirman que una fracción significativa de la discrepancia inicial emana de la sobreestimación óptica del satélite en condiciones de estancamiento invernal.

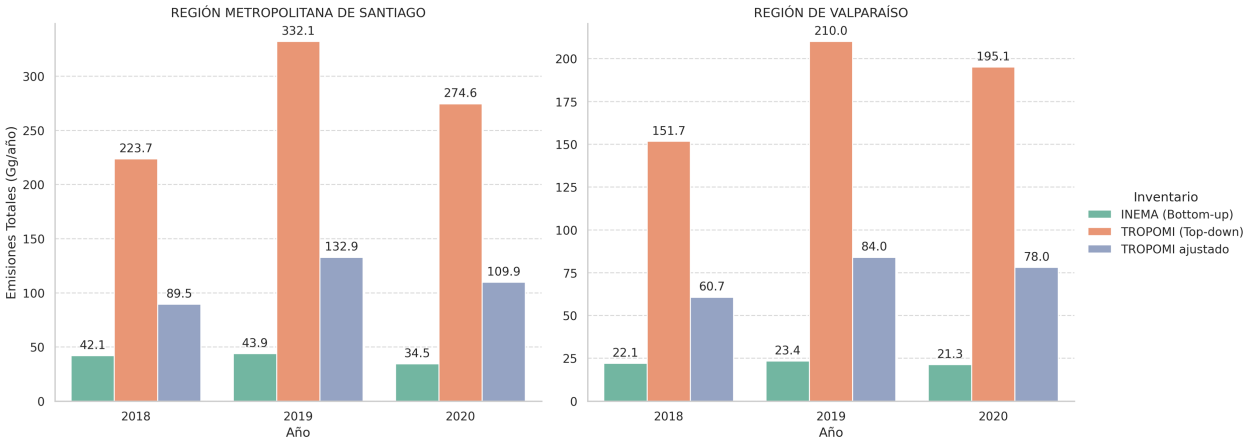


Figura 4.5: Emisiones anuales de NO_x en las Regiones Metropolitana y de Valparaíso, según los 3 inventarios analizados.

El ejercicio anterior logró disminuir las emisiones estimadas de TROPOMI hasta en un 40%. Sin embargo, este ajuste sólo actúa directamente sobre el término de sumidero, dado que este es linealmente proporcional, más no en el termino de divergencia, dado que este se relaciona con el cambio espacial de la VCD. Si bien este ejercicio logra estabilizar matemáticamente las estimaciones Top-Down, la persistencia de una brecha residual significativa (e.g., 109.9 Gg/año en TROPOMI ajustado vs. 34.5 Gg/año en INEMA para Santiago en 2020) invita a una reflexión profunda sobre los insumos del modelamiento. Forzar a TROPOMI a coincidir exactamente con la simulación de CHIMERE asume implícitamente que la línea base del modelo de transporte químico es representativa de la realidad. Sin embargo, CHIMERE es alimentado operativamente por el inventario INEMA, el cual acarrea deficiencias estructurales intrínsecas a su naturaleza Bottom-Up.

INEMA depende de factores de actividad teóricos que tienden a subestimar el presupuesto total de NO_x, ya que omiten la degradación termodinámica real del parque automotriz y el encendido en frío. El enfoque contable de INEMA no logra capturar los patrones de congestión vehicular severa ni fuentes no declaradas, tales como la maquinaria pesada fuera de ruta (off-road) y la actividad logística portuaria en maniobra.

A pesar de la severa constricción de la densidad de columna aplicada mediante el factor α, el modelo FDA persiste en reportar un presupuesto de masa sistemáticamente superior al inventario contable INEMA. La preservación de esta brecha residual tiene una explicación estrictamente físico-matemática en la estructura

de la ecuación de continuidad. El ajuste exploratorio (α) actúa principalmente sobre la magnitud absoluta de la columna troposférica, lo que reduce de forma directamente proporcional el término del sumidero químico ($S = \frac{LV}{\tau}$), ya que este es lineal a la VCD. Sin embargo, el ajuste escalar no afecta de igual manera al término advectivo de divergencia ($D = \nabla \cdot (LV\mathbf{w})$). Puesto que este último es lineal a la razón de cambio espacial (los gradientes topológicos entre celdas) y el factor estacional preserva íntegramente la topología y varianza interdiaria nativa capturada por el instrumento, los fuertes gradientes espaciales alrededor de las plumas activas se mantienen inalterados. En consecuencia, el término de transporte horizontal sigue capturando la inyección física real de masa en las zonas de congestión vehicular e industrial que INEMA omite, demostrando que la discrepancia observada tras la corrección no es un artefacto óptico, sino emisión atmosférica genuina que sobrevive al constreñimiento del sumidero.

Tabla 4.1: Comparación de emisiones estimadas (Gg/año) para las 5 comunas de mayor área superficial en la Región Metropolitana durante 2019. Inventarios INEMA (I), TROPOMI (T) y TROPOMI ajustado (TA).

Comuna	INEMA	TROPOMI	TROPOMI ajustado	T-I	TA-I	Área (km^2)
San José de Maipo	0.22	48.00	19.20	47.77	18.98	4983.52
Melipilla	1.28	17.60	7.04	16.32	5.76	1352.65
Lo Barnechea	0.82	28.24	11.30	27.42	10.48	1023.61
Colina	1.18	59.52	23.81	58.34	22.63	970.86
Alhué	0.10	5.60	2.24	5.51	2.14	844.40

Tabla 4.2: Comparación de emisiones estimadas (Gg/año) para las 5 comunas de menor área superficial en la Región Metropolitana durante 2019. Inventarios INEMA (I), TROPOMI (T) y TROPOMI ajustado (TA).

Comuna	INEMA	TROPOMI	TROPOMI ajustado	T-I	TA-I	Área (km^2)
San Ramón	0.25	0.78	0.31	0.53	0.06	6.31
Lo Prado	0.23	0.63	0.25	0.40	0.02	6.54
Independencia	0.18	0.72	0.29	0.53	0.10	7.35
Lo Espejo	0.33	0.85	0.34	0.51	0.01	8.25
Pedro Aguirre Cerda	0.35	1.15	0.46	0.79	0.11	8.73

Tabla 4.3: Comparación de emisiones estimadas (Gg/año) para las 5 comunas de mayor área superficial en la Región de Valparaíso durante 2019. Inventarios INEMA (I), TROPOMI (T) y TROPOMI ajustado (TA).

Comuna	INEMA	TROPOMI	TROPOMI ajustado	T-I	TA-I	Área (km^2)
Petorca	0.09	6.49	2.60	6.40	2.50	1515.74
Cabildo	0.19	11.50	4.60	11.31	4.41	1455.00
Putaendo	0.22	8.50	3.40	8.28	3.18	1451.23
San Esteban	0.25	10.74	4.30	10.49	4.05	1374.54
Los Andes	0.37	20.89	8.35	20.51	7.98	1234.49

Tabla 4.4: Comparación de emisiones estimadas (Gg/año) para las 5 comunas de menor área superficial en la Región de Valparaíso durante 2019. Inventarios INEMA (I), TROPOMI (T) y TROPOMI ajustado (TA).

Comuna	INEMA	TROPOMI	TROPOMI ajustado	T-I	TA-I	Área (km^2)
El Quisco	0.13	0.48	0.19	0.35	0.06	51.44
Calera	0.13	1.37	0.55	1.24	0.42	59.99
Concón	1.58	1.65	0.66	0.07	−0.92	76.93
La Cruz	0.06	2.26	0.90	2.20	0.84	77.86
Villa Alemana	0.86	2.28	0.91	1.41	0.05	96.37

Al desglosar los resultados a escala comunal (4.1, 4.2, 4.3 y 4.4), el análisis revela que la magnitud de la diferencia entre el inventario Top-Down (TROPOMI) y el Bottom-Up (INEMA) es fuertemente dependiente del área superficial de cada comuna. En las comunas de mayor extensión territorial, la divergencia entre ambos modelos es dramática. Por ejemplo, en la Región Metropolitana, San José de Maipo (con un área masiva de 4983.52 km^2) exhibe una sobreestimación satelital (T-I) de 47.77 Gg/año. Un comportamiento proporcional se observa en la Región de Valparaíso, donde Petorca (1515.74 km^2) lidera las diferencias con 6.40 Gg/año por sobre el valor reportado.

Esta discrepancia masiva en comunas precordilleranas o de amplia extensión no debe interpretarse puramente como una omisión de fuentes locales por parte de INEMA. Más bien, corresponde a un artefacto espacial derivado del acoplamiento entre geometrías comunales gigantescas y la resolución de la grilla satelital (9×9 km^2). Al integrar el flujo másico total sobre polígonos tan extensos que intersectan relieves complejos, el algoritmo de intersección espacial termina asimilando celdas periféricas que no reflejan emisiones locales, sino que contienen la pluma de contaminantes advectada (transportada pasivamente por los vientos) desde los núcleos urbanos principales.

El efecto contrario (y estabilizador) se comprueba al observar las comunas de menor área superficial. En territorios urbanos diminutos de la depresión intermedia, la diferencia entre TROPOMI e INEMA se contrae drásticamente. En la Región Metropolitana, San Ramón (apenas 6.31 km^2) muestra una diferencia de solo

0.53 Gg/año. De forma análoga, en la Región de Valparaíso, la comuna de El Quisco (51.44 km^2) registra una diferencia de apenas 0.35 Gg/año. Esto demuestra que la concordancia entre ambas metodologías es significativamente superior cuando el polígono de control se acota y coincide más estrictamente con el origen físico de la fuente, limitando el ruido de las plumas de transporte vecino.

Si bien el factor de área explica las discrepancias extremas en la periferia cordillerana, el hecho de que las comunas pequeñas y urbanas (como San Ramón, Lo Prado o El Quisco) sigan presentando una diferencia neta positiva a favor de TROPOMI ofrece una lectura complementaria sobre el desempeño del modelamiento. Aunque el artefacto de área aquí es mínimo, el satélite sigue detectando más masa de la esperada. Esto refuerza indirectamente la noción de que CHIMERE al ser alimentado y condicionado desde su base por INEMA, hereda una subestimación estructural de la actividad local real (como el tráfico denso y los encendidos en frío), fuentes que el inventario contable omite pero que el sensor satelital sí es capaz de detectar sobre el asfalto urbano.

4.2. Análisis de variabilidad temporal a nivel puntual

La comprensión integral de la calidad del aire exige abandonar temporalmente la agregación espacial de las masas anuales para explorar la dinámica transitoria diurna y estacional. En esta sección, el análisis adopta un enfoque continuo de alta resolución temporal, evaluando la serie de tiempo mes a mes del inventario Top-Down en tres locaciones geográficas del dominio que representan condiciones de frontera atmosférica radicalmente opuestas: el Centro de Santiago como matriz urbana saturada, el Puerto de Valparaíso como nodo de transporte costero, y un punto rural montañoso como control de fondo.

4.2.1. Dinámica temporal en matriz urbana: Centro de Santiago

La evolución temporal de las emisiones estimadas sobre el Centro de Santiago exhibe un agudo forzamiento estacional, evidenciando la compleja interacción entre la actividad antrópica y la termodinámica de la cuenca. Como se observa en la serie cronológica diaria (Figura 4.6), el inventario Top-Down traza una oscilación sinusoidal alineada con la calidez solar austral. Durante los meses de verano (enero a marzo), las emisiones registran sus magnitudes más bajas y estables, fluctuando en torno a los 300 kg/h. Esta depresión estival responde a la máxima dispersión vertical inducida por una Capa Límite Planetaria (PBL) térmicamente expandida y a la alta actividad fotolítica que remueve rápidamente el NO_2.

Sin embargo, el análisis de dispersión mensual mediante diagramas de caja (Figura 4.7) revela que la transición hacia el invierno (junio a agosto) no solo eleva la mediana de emisión por sobre los 550 kg/h, sino que dispara dramáticamente la volatilidad del sistema. El Rango Intercuartílico (IQR) se expande de forma asimétrica, reflejando el carácter episódico de la contaminación invernal santiaguina: alternancia abrupta entre días de ventilación post-sistemas frontales (extremos inferiores) y eventos severos de estancamiento térmico por subsidencia (extremos superiores).

Esta dicotomía queda comprobada matemáticamente al evaluar la Función de Distribución Empírica (FDE) a nivel estacional (Figura 4.8). La curva de invierno se separa de forma absoluta de la curva de verano, evidenciando un cambio de régimen estadístico completo. Mientras que en verano la probabilidad de superar un flujo de 450 kg/h es virtualmente nula (curva empinada y confinada a la izquierda), en invierno existe más de un 80% de probabilidad empírica de exceder dicha magnitud. Físicamente, esta segregación estacional consolida el efecto combinado de la inyección de fuentes adicionales (calefacción residencial) y el colapso altitudinal de la PBL que concentra la pluma vehicular cerca de la superficie.

4.2.2. Dinámica temporal en matriz costera/industrial: Puerto de Valparaíso

En agudo contraste, la celda puntual correspondiente al Puerto de Valparaíso demuestra un desacople estructural respecto a la estacionalidad térmica de los valles interiores. La serie de tiempo (Figura 4.6) muestra un perfil marcadamente plano, confinado de manera robusta en una banda operativa de 200 a 260 kg/h a lo largo de todo el ciclo anual.

La inspección de la varianza mensual (Figura 4.7) constata una fuerte homoscedasticidad intermensual (varianza constante). Las medianas permanecen inamovibles y la longitud de las cajas (IQR) no sufre expansiones invernales. Esta firma estadística es el sello inconfundible de procesos logísticos e industriales continuos que operan bajo un régimen de forzamiento ininterrumpido —tráfico constante de naves mercantes, maquinaria portuaria y transporte logístico pesado— el cual no decrece durante los meses cálidos.

La confirmación definitiva de esta independencia estacional se observa en la función de distribución empírica del nodo portuario (Figura 4.8). A diferencia de Santiago, las cuatro curvas probabilísticas estacionales (verano, otoño, invierno y primavera) se superponen casi perfectamente, colapsando en una única función de distribución. Esto demuestra empíricamente que, gracias a la constante ventilación impuesta por el régimen de brisa marina, el algoritmo FDA logra invertir un flujo de emisión puramente antropogénico, el cual es estadísticamente inmune al ciclo solar e independiente del estancamiento anticiclónico invernal.

4.2.3. Dinámica temporal en zona de control

Para garantizar la neutralidad orográfica de la inversión matemática y descartar la creación de fuentes artificiales producto de inestabilidades numéricas, se evaluó un punto de control rural ubicado en la precordillera andina. La serie temporal (Figura 4.6) confirma que las emisiones netas en este dominio oscilan simétricamente alrededor del cero, sin superar jamás el umbral físico operativo del modelo.

El análisis de los diagramas de caja (Figura 4.7) añade una capa crítica de validación: la ausencia absoluta de valores atípicos (outliers) superiores o asimetrías positivas durante los meses de invierno. Esto indica que ni siquiera bajo los peores episodios de estancamiento invernal en la cuenca de Santiago, el modelo induce matemáticamente el transporte espurio de plumas de contaminación hacia las alturas precordilleranas colindantes.

Finalmente, la FDE del punto de control (Figura 4.8) se comporta topológicamente como una función de paso de Heaviside centrada en 0 kg/h. Esta verticalidad perfecta de la probabilidad acumulada implica que cualquier desviación marginal corresponde estrictamente al ruido blanco electrónico y radiométrico inherente del instrumento satelital TROPOMI. El aplanamiento y compresión estadística de esta curva de control constituye la prueba empírica definitiva de que el operador diferencial esférico de segundo orden preserva el aislamiento atmosférico impuesto por la topografía compleja de Chile Central.

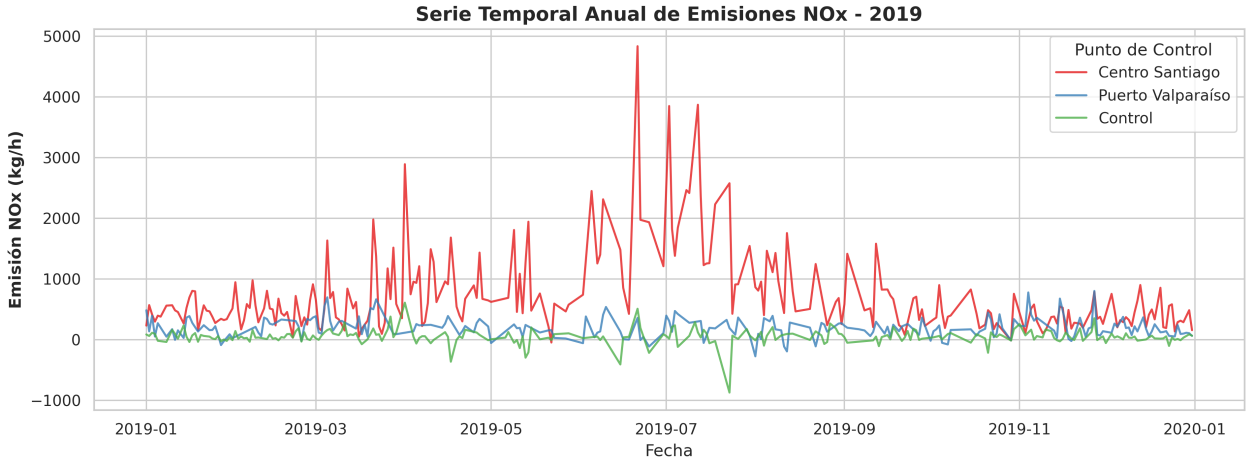


Figura 4.6: Evolución temporal de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante el año 2019 en 3 puntos de interés analizados.

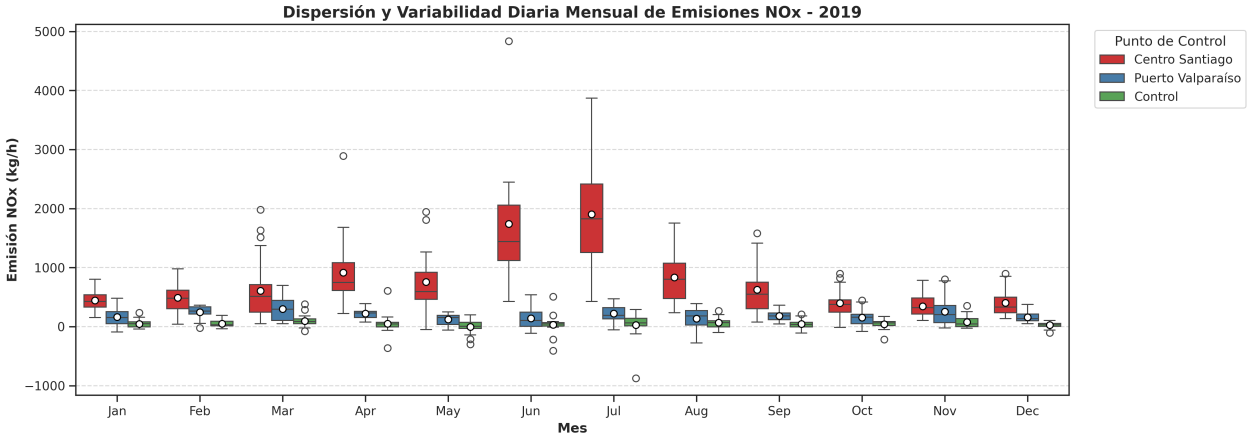


Figura 4.7: Dispersión mensual de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante el año 2019 en 3 puntos de interés analizados.

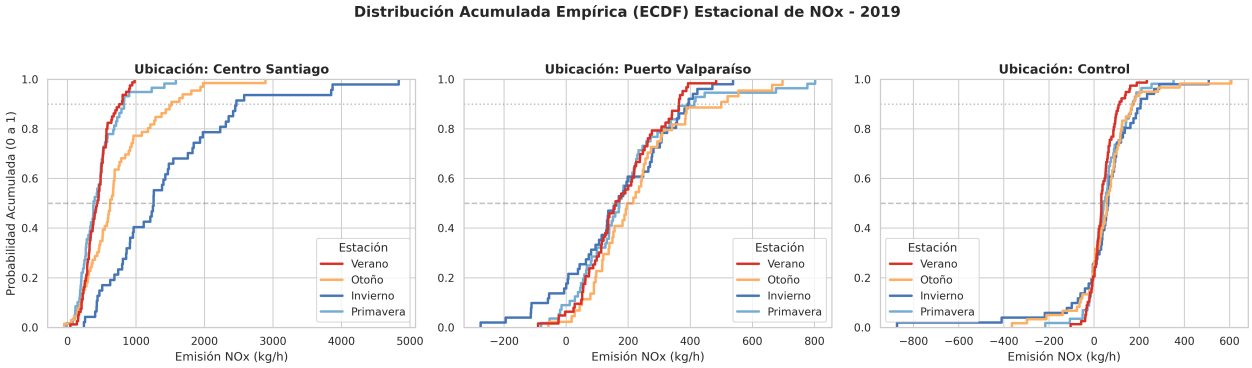


Figura 4.8: Función de distribución empírica a nivel estacional de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante el año 2019 en 3 puntos de interés analizados.

4.3. Propagación de errores y evaluación de incertidumbre

La validación definitiva de un inventario satelital Top-Down exige la transparencia analítica de sus márgenes de error. Esta sección modela la propagación de errores mediante la resolución formal de las varianzas en cuadratura a escala de grilla completa, evaluando espacialmente el comportamiento de la incertidumbre matemática y contrastándola con las limitantes meteorológicas operacionales del sensor óptico.

4.3.1. Cuantificación de la incertidumbre espacial y propagación del error en el modelo FDA

La varianza total del modelo se estimó aplicando rigurosamente la regla analítica de propagación sobre la ecuación diferencial esférica, integrando los campos diarios de incertidumbre de la columna troposférica de TROPOMI ($\sigma_{V,i}$) y los márgenes de error asignados a las variables de WRF-CHIMERE ($\sigma_w, \sigma_\tau, \sigma_L$). El despliegue cartográfico de la incertidumbre absoluta revela una estructura espacial directamente proporcional a la intensidad de la fuente antropogénica. En el corazón de los hotspots urbanos e industriales (donde la señal es intensa), el error absoluto es máximo debido a la magnificación del término de transporte impulsado por las velocidades del viento dentro de la capa límite planetaria. Sin embargo, al evaluar la incertidumbre relativa en porcentaje (%), la topología del error se invierte de forma dramática.

A pesar de la alta relación señal-ruido en los píxeles urbanos saturados de Santiago y Valparaíso, la propagación analítica de errores a nivel de grilla reveló niveles sumamente altos de incertidumbre global en el dominio. Tal como se consolida cuantitativamente en la Tabla 4.5, el error supera consistentemente el 100% a escala diaria, debido a que el operador derivativo de la divergencia amplifica el ruido instrumental intrínseco del satélite. Al evaluar la evolución anual, se identificó un patrón sistemático de anomalías extremas durante el invierno, donde el error relativo mensual escaló desde un 113.38% en septiembre hasta alcanzar máximos por sobre el 180% en los meses críticos de junio y julio (181.61% y 184.82%, respectivamente). Esta extrema volatilidad y sobreestimación de la incertidumbre no responde a un error de cálculo numérico, sino a la conjunción de limitantes meteorológicas observacionales: el estancamiento invernal de la capa límite y la severa

pérdida de datos por nubosidad (cloud masking bias) restringen el balance de masa a una submuestra sesgada de días, disparando matemáticamente la incertidumbre fraccional. Por consiguiente, los elevados márgenes de error reportados demuestran empíricamente que la teledetección espacial mediante enfoques Top-Down presenta barreras operacionales significativas bajo regímenes de invierno extremo, donde el operador inverso se vuelve altamente inestable.

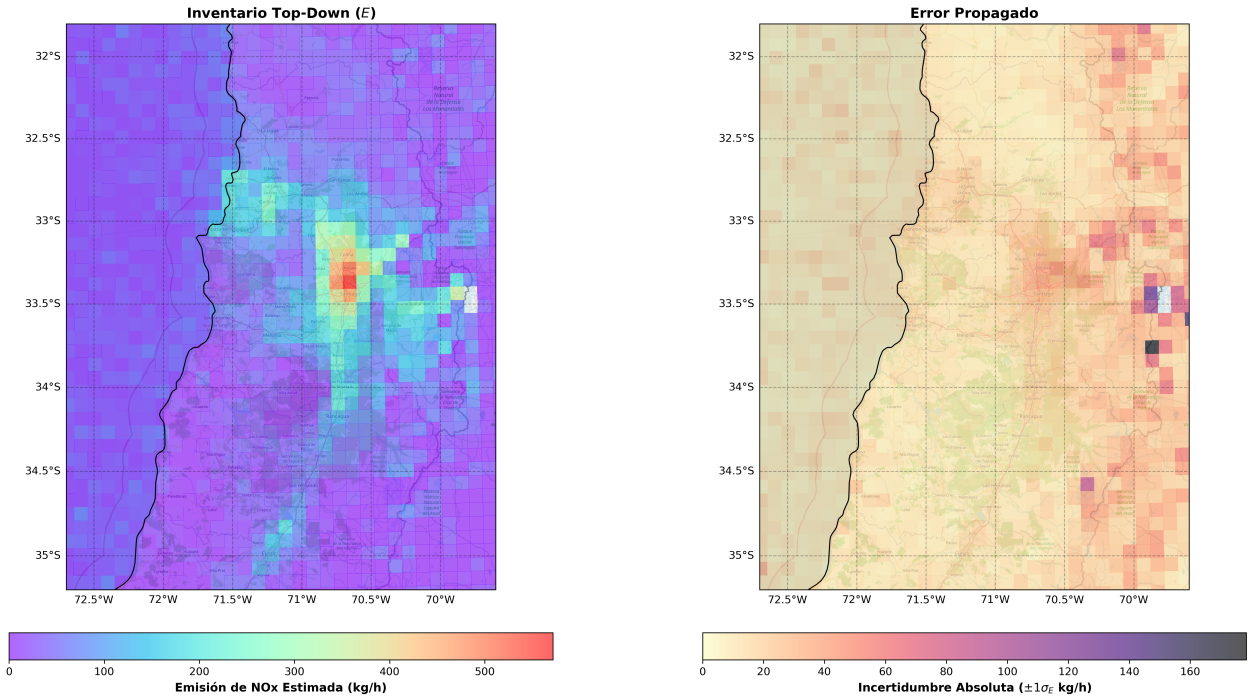


Figura 4.9: Distribución espacial de la incertidumbre relativa mensual promedio (%) del inventario Top-Down de NO_x calculado mediante la propagación analítica de errores en cuadratura para el dominio de Chile Central en el año 2019.

Tabla 4.5: Resumen anual de emisiones promedio, error absoluto e incertidumbre relativa estacional calculada mediante el modelo FDA para el año 2019 (Filtro de emisión activa > 2.0 kg/h).

Mes	Emisión Promedio (kg/h)	Error Absoluto (kg/h)	Error Relativo (%)
Enero	21.20	14.02	133.75
Febrero	24.26	15.47	126.39
Marzo	27.81	17.76	133.18
Abril	31.66	20.18	137.99
Mayo	31.05	26.16	161.17
Junio	37.34	35.87	181.61
Julio	37.48	35.56	184.82
Agosto	35.24	28.01	158.77
Septiembre	38.91	20.34	113.38
Octubre	29.13	17.44	120.24
Noviembre	28.59	16.46	118.36
Diciembre	18.39	13.81	137.47

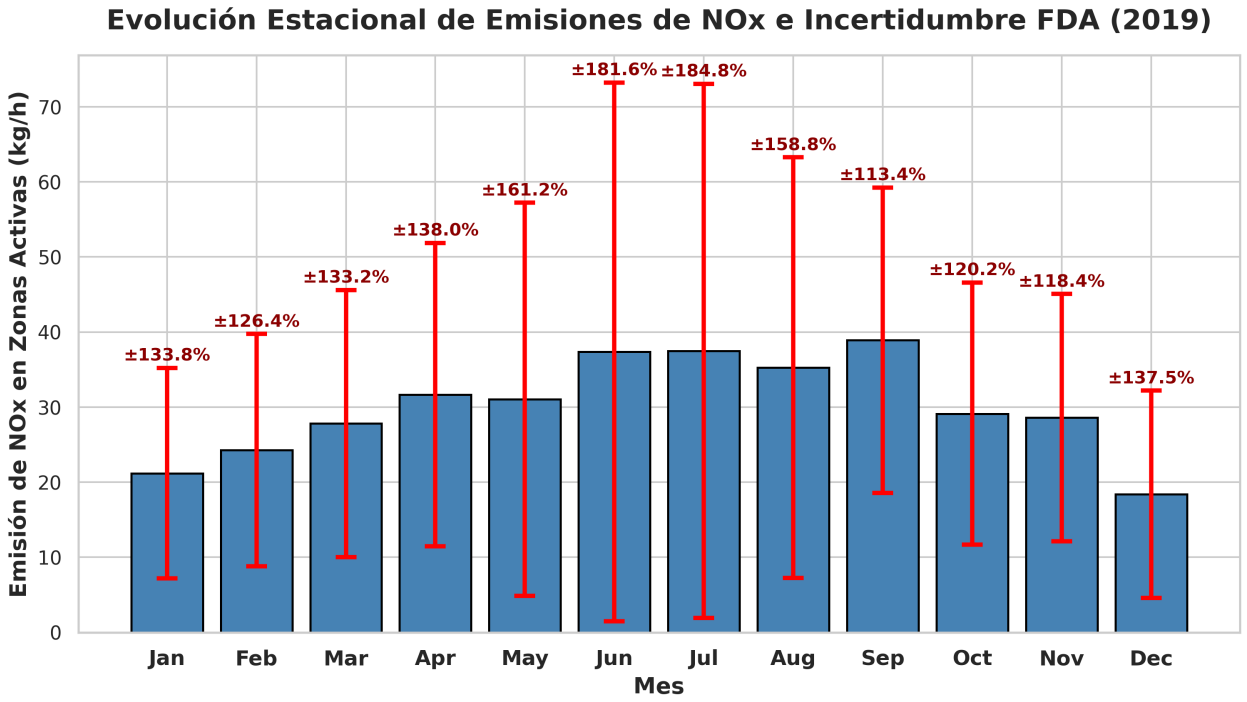


Figura 4.10: Evolución anual de la incertidumbre relativa mensual promedio (%) del inventario Top-Down de NO_x calculado mediante la propagación analítica de errores en cuadratura para el dominio de Chile Central en el año 2019.

4.3.2. Evaluación del desempeño del modelo y precisión de las detecciones satelitales

A pesar de la robustez alcanzada en los promedios mensuales, el modelo de inversión FDA enfrenta restricciones físicas operacionales severas inducidas por la meteorología diaria. La mayor fuente de distorsión transitoria corresponde a la amplificación cinemática del ruido instrumental. En días caracterizados por eventos meteorológicos extremos o incursiones de vientos sinópticos intensos dentro de la PBL (superiores a los 8 m/s o 10 m/s), el término de transporte horizontal se vuelve masivo. Bajo estas condiciones cinemáticas, cualquier pequeña fluctuación espacial aleatoria en la radiación medida por el satélite es interpretada erróneamente por la derivada espacial de cuarto orden como una gigantesca masa de gas desplazándose a gran velocidad, induciendo la creación de fuentes y sumideros espurios adyacentes.

El proceso de promediado temporal sobre los días estables remanentes actúa finalmente como un filtro pasabanda numérico: debido a que las variaciones instrumentales diarias y el ruido de viento remanente operan como variables aleatorias estadísticamente independientes, la sumatoria en cuadratura cancela las fluctuaciones extremas, decantando en un mapa de emisiones mensuales limpio, estable y con buen comportamiento en la reproducción de fenómenos tanto espaciales como temporales relacionados a las emisiones de óxidos de nitrógeno en Chile central.

4.4. Síntesis

En conclusión, el análisis comparativo, temporal y de incertidumbre desarrollado en este capítulo permitió evaluar con rigor científico las capacidades y limitantes del inventario *Top-Down* frente al registro oficial *Bottom-Up* (INEMA). A escala regional, los resultados demostraron que el modelo de Divergencia de Flujo (FDA) logra capturar la distribución espacial de los principales núcleos emisores en Chile Central, identificando con alta fidelidad las plumas de la Región Metropolitana, los complejos industriales costeros y los corredores de transporte terrestre.

No obstante, la evaluación comunal reveló importantes divergencias asociadas a la resolución espacial y a las diferencias metodológicas entre ambos enfoques. En comunas de gran extensión territorial y relieve montañoso, las estimaciones satelitales presentaron sobreestimaciones cuantitativas provocadas por la intersección de celdas de 9×9 km^2 que contienen masa advectada desde el valle central. Por el contrario, en las comunas urbanas consolidadas, la brecha entre ambos inventarios se redujo significativamente, evidenciando que las diferencias responden principalmente a la incapacidad de los métodos contables estáticos para asimilar la congestión dinámica, la obsolescencia del parque vehicular y las condiciones reales de combustión en la baja troposfera.

El análisis de variabilidad temporal a nivel puntual ratificó la sensibilidad del modelo para diferenciar regímenes atmosféricos contrastantes. Mientras que el Centro de Santiago exhibió un ciclo estacional invernal dominado por el estancamiento meteorológico y las emisiones adicionales de calefacción, la zona portuaria de Valparaíso mostró un perfil constante asociado a la actividad logística ininterrumpida, y el punto

de control cordillerano permaneció confinado bajo el umbral de ruido instrumental (< 2.0 kg/h), descartando transportes espurios por efecto de la orografía.

Finalmente, la propagación analítica de errores demostró que la agregación mensual actúa como un filtro pasabanda efectivo frente al ruido cinemático diario. En su conjunto, los hallazgos de este capítulo demuestran que, si bien la teledetección satelital presenta restricciones operacionales a escala comunal fina, constituye una herramienta *Top-Down* complementaria y de gran potencial para auditar, actualizar y fortalecer los inventarios contables de emisiones en cuencas atmosféricas complejas.

Conclusiones y recomendaciones

Conclusiones generales

Esta investigación demostró empíricamente que el modelamiento satelital *Top-Down*, mediante la aplicación del modelo de Divergencia de Flujo (FDA) sobre observaciones del sensor TROPOMI, constituye un marco analítico maduro y robusto para constreñir la magnitud y distribución espacial de las emisiones de óxidos de nitrógeno (NO_x) en Chile Central. Con ello se confirma la hipótesis principal del estudio, la observación espacial permite evaluar y auditar los inventarios antropogénicos sobre dominios urbanos e industriales complejos, aunque su validez operativa se encuentra intrínsecamente supeditada a la dinámica meteorológica y a la topografía del territorio.

En términos epistemológicos, esta intercomparación obligó a replantear la relación entre las metodologías contables (*Bottom-Up*) y la teledetección. Tradicionalmente, la gestión ambiental ha asumido los inventarios oficiales como "líneas base" exactas. Los hallazgos de esta tesis demuestran que dicha premisa es limitada, ya que enfrenta dos paradigmas con naturalezas espaciotemporales distintas: la contabilidad estadística estática (basada en factores teóricos) frente a la captura termodinámica y fotoquímica instantánea de la atmósfera. En consecuencia, la aproximación satelital no debe concebirse como un reemplazo de los inventarios terrestres, sino como un instrumento de calibración de alto valor que transparenta la rigidez de los modelos contables y detecta la variabilidad real de las fuentes.

Asimismo, desde la perspectiva de la disponibilidad de datos, se concluye que la teledetección espacial ofrece una cobertura geográfica continua sobre la totalidad del territorio. Esta capacidad observacional permite superar las severas barreras económicas y tecnológicas que impiden la instalación y mantención de redes de monitoreo *in-situ* extensivas en Chile. No obstante, esta ventaja de cobertura espacial se ve significativamente limitada por las condiciones climatológicas locales; la elevada frecuencia de nubosidad y sistemas frontales durante los meses de invierno provoca una pérdida considerable de observaciones satelitales válidas, restringiendo la densidad temporal del inventario precisamente durante el periodo de mayor estancamiento térmico y deterioro de la calidad del aire.

Por otra parte, se concluye que la confiabilidad del enfoque *Top-Down* posee una fuerte dependencia escalar. A nivel regional y promediado mensualmente, el modelo inverso exhibe una elevada solidez para delimitar macro-plumas de contaminación y caracterizar el metabolismo estacional de las cuencas. Sin embargo, a escala diaria y local, la presencia de valles cerrados y la fuerte subsidencia térmica andina imponen severas restricciones advectivas. Por ende, las estimaciones satelitales diarias aisladas no poseen la representatividad requerida para fungir como instrumentos de fiscalización a microescala o nivel de chimenea puntual.

En conclusión, la determinación de la incertidumbre global de las emisiones en Chile Central trasciende la búsqueda de un margen de error estático; representa la delimitación del umbral operativo donde la observación espacial es físicamente válida. La integración metodológica lograda en este trabajo aporta a la comunidad

científica y a las entidades regulatorias una plataforma transparente, de código abierto y reproducible, consolidando a la teledetección como un pilar ineludible para la modernización de las políticas de control atmosférico en el país.

Conclusiones específicas

Desde la perspectiva del preprocesamiento radiativo, se concluye que los perfiles verticales *a priori* globales (como TM5-MP) son estructuralmente deficientes para modelar valles de topografía compleja. La sustitución de estos perfiles por simulaciones regionales de alta resolución (CHIMERE) demostró ser una exigencia metodológica ineludible, logrando subsanar la subestimación sistemática del Factor de Masa de Aire (AMF) y recuperando hasta un 44% de la masa de NO_2 sobre los núcleos densos de Santiago y Valparaíso.

En relación con la arquitectura del modelo FDA, se comprobó que la resolución de la ecuación de conservación de masa demanda un tratamiento geométrico estricto. Para neutralizar las aberraciones ópticas del barrido satelital (efecto *bow-tie*) y evitar violaciones al balance de masa durante los re-grillados, fue imperativo operar exclusivamente con variables intensivas y esquemas de interpolación conservativa. Pese a este blindaje numérico, la transición hacia mallas regulares induce una difusión espacial intrínseca que tiende a suavizar los gradientes más agudos de las plumas locales.

Respecto a las capacidades del modelo *Top-Down* para identificar fuentes no contabilizadas, se concluye que la naturaleza agnóstica de la teledetección por barridos (*swath*) proporciona una ventaja determinante sobre la contabilidad tradicional. Mientras que los inventarios *Bottom-Up* como INEMA se encuentran acotados de forma estricta a fuentes declaradas formalmente y a metodologías de categorización fija (códigos IPCC), la espectrometría satelital integra analíticamente la totalidad de la masa troposférica de NO_x en la línea de visión del sensor. Esto permite al modelo FDA detectar fuentes habitualmente omitidas o subestimadas en los registros oficiales, tales como las emisiones marítimas y portuarias en tránsito, maquinaria pesada fuera de ruta (*off-road*), combustiones industriales informales o no registradas, el impacto acumulado del encendido de motores en frío y los patrones de congestión vehicular severa no capturados por las encuestas de origen-destino.

En cuanto a la intercomparación cuantitativa frente a INEMA, las disparidades de magnitud radican fundamentalmente en la representatividad temporal de la captura. Dado que el sobrepaso satelital (14:00 horas locales) ocurre durante el valle del ciclo bimodal de tráfico, la integración de un Factor de Expansión Diaria (FED) fundamentado en mediciones viales *in-situ* resultó esencial para armonizar las escalas. La brecha residual entre ambos modelos expuso además falencias estructurales críticas en los inventarios contables, los cuales, al depender de factores de emisión teóricos, fracasan en capturar la degradación termodinámica real y el estado de obsolescencia del parque vehicular chileno.

Finalmente, el análisis de propagación de errores demostró que el operador inverso es sumamente vulnerable a las fluctuaciones cinemáticas extremas. Se revelaron niveles de incertidumbre que superan el 100% a escala diaria, amplificados mecánicamente por el operador derivativo de la divergencia sobre el ruido instrumental.

De manera crítica, se evidenció un patrón sistemático de anomalías invernales, con máximos de error relativo por sobre el 180% en los meses de mayor estancamiento térmico e inestabilidad frontal (junio y julio).

Recomendaciones

La gestión de la calidad del aire a nivel global evidencia una profunda asimetría tecnológica entre el hemisferio norte y el sur global. Mientras los países desarrollados operan densas redes de medición *in-situ*, regiones como Sudamérica enfrentan presupuestos restrictivos e infraestructuras discontinuas. En este contexto, se recomienda estratégicamente la adopción institucional del modelamiento satelital inverso como un "puente tecnológico" para democratizar la vigilancia ambiental, permitiendo auditar matrices vehiculares e industriales sin requerir inversiones inasumibles en hardware terrestre.

Para consolidar esta adopción en Chile y la región andina, es imperativo abandonar la importación pasiva de metodologías diseñadas para topografías llanas. Se recomienda a futuras investigaciones enfocar sus esfuerzos en el desarrollo de algoritmos de inversión y estimación de la Capa Límite Planetaria (PBL) adaptados a la subsidencia térmica y la orografía extrema. Paralelamente, se debe perfeccionar la extrapolación temporal del inventario transitando desde perfiles teóricos hacia modelos dinámicos de asignación de tráfico basados en *Big Data* urbano.

Asimismo, se sugiere evaluar la sensibilidad del Enfoque de Divergencia de Flujo (FDA) frente a la elección del modelo de transporte químico (CTM) utilizado como condición de contorno. Resulta altamente pertinente explorar el acoplamiento del algoritmo FDA con otros CTMs de resolución regional o local distintos de CHIMERE disponibles en Chile, tales como EMEP, LOTOS-EUROS o CMAQ. Esta intercomparación de modelos numéricos base permitirá aislar la incertidumbre asociada a la parametrización de la concentración del radical OH, la dinámica fotoquímica regional y la altura simulada de la capa límite planetaria.

En la misma línea de expansión metodológica, se recomienda extender la aplicación de la ecuación de balance de masa FDA hacia otros gases traza troposféricos recuperados por sensores satelitales ópticos, tales como el monóxido de carbono (CO). De igual forma, dada la relevancia crítica del material particulado ($MP_{2.5}$ y MP_{10}) en los planes de descontaminación del centro-sur de Chile, se aconseja indagar en el desarrollo e implementación de metodologías de inversión específicas para aerosoles (como esquemas de Inversión Bayesiana, Inversión Adjunta o Filtros de Kalman). Esto permitirá abordar la cuantificación *Top-Down* de fuentes de partículas, cuyos procesos de deposición seca/húmeda y química heterogénea secundaria exigen esquemas inversos distintos a la divergencia advectiva de gases de vida corta.

A nivel institucional, se insta al Ministerio del Medio Ambiente a avanzar hacia esquemas de *Asimilación de Datos* (*Data Assimilation*). Los mapas de emisión empíricos generados por metodologías FDA deben integrarse como condiciones de borde y forzamientos dinámicos en modelos numéricos de pronóstico (ej. WRF-Chem), permitiendo corregir y calibrar las alertas tempranas durante episodios críticos de preemergencia ambiental.

Mirando hacia próximas investigaciones, se recomienda adaptar de manera proactiva los flujos computacionales en Python desarrollados en esta tesis para asimilar la futura constelación de satélites geoestacionarios de composición atmosférica. La capacidad de contar con resoluciones espectrales horarias eliminaría la mayor fuente de incertidumbre estructural actual, consolidando definitivamente a la teledetección como la herramienta rectora para la salud pública y la planificación urbana en el hemisferio sur.

Bibliografía

[Agencia Espacial Europea, 2025] Agencia Espacial Europea (2025). Copernicus: The european earth observation programme. https://www.esa.int/Applications/Observing_the_Earth/Copernicus. Accedido: 06-08-2025.

[Agencia Espacial Europea, 2026a] Agencia Espacial Europea (2026a). Mission Sentinel 5-P [Fotografía]. https://esoc.esa.int/content/sentinel-5p. Accedido: 03-07-2026.

[Agencia Espacial Europea, 2026b] Agencia Espacial Europea (2026b). Sentiwiki - sentinel-5p. https://sentiwiki.copernicus.eu/web/sentinel-5p. Accedido: 06-04-2026.

[Álamos et al., 2022] Álamos, N., Huneeus, N., Opazo, M., Osses, M., Puja, S., Pantoja, N., Denier van der Gon, H., Schueftan, A., Reyes, R., and Calvo, R. (2022). High-resolution inventory of atmospheric emissions from transport, industrial, energy, mining and residential activities in Chile. *Earth System Science Data*, 14(1):361–379. https://doi.org/10.5194/essd-14-361-2022.

[Alamos et al., 2023] Alamos, N., Hunneus, N., Osses, M., Opazo, M., Suarez, I., Jimenez, M., and Encalada, B. (2023). Inema: High resolution inventory of atmospheric emissions of chile. https://doi.org/10.5281/zenodo.7970953.

[Asociación Española de Teledetección, 2025] Asociación Española de Teledetección (2025). Revisando el concepto de resolución en teledetección. https://www.aet.org.es/?q=revista37-11. Accedido: julio 4, 2025.

[Batterman et al., 2015] Batterman, S., Cook, R., and Justin, T. (2015). Temporal variation of traffic on highways and the development of accurate temporal allocation factors for air pollution analyses. *Atmospheric Environment*, 107:351–363. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.02.047.

[Beirle et al., 2011] Beirle, S., Boersma, K. F., Platt, U., Lawrence, M. G., and Wagner, T. (2011). Megacity emissions and lifetimes of nitrogen oxides probed from space. *Science*, 333(6050):1737–1739. https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1207824.

[Beirle et al., 2019] Beirle, S., Borger, C., Dörner, S., Li, A., Hu, Z., Liu, F., Wang, Y., and Wagner, T. (2019). Pinpointing nitrogen oxide emissions from space. *Science Advances*, 5(11):eaax9800. https://www.science.org/doi/10.1126/sciadv.aax9800.

[Bovensmann et al., 2010] Bovensmann, H., Buchwitz, M., Burrows, J. P., Reuter, M., Krings, T., Gerilowski, K., Schneising, O., Heymann, J., Tretner, A., and Erzinger, J. (2010). A remote sensing technique for global monitoring of power plant co_2 emissions from space and related applications. *Atmospheric Measurement Techniques*, 3(4):781–811. https://amt.copernicus.org/articles/3/781/2010/.

[Burkholder et al., 2020] Burkholder, J. B., Abbatt, J. P. D., Cappa, C., Dibble, T. S., Kolb, C. E., Orkin, V. L., Wilmouth, D. M., Sander, S. P., Barker, J. R., Crounse, J. D., Huie, R. E., Kurylo, M. J., Percival, C. J., and Wine, P. H. (2020). Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies. Technical report, NASA. https://science.jpl.nasa.gov/projects/data-evaluation/. Accedido: 03-07-2025.

[Campos, 2025] Campos, G. (2025). TENDENCIAS ANUALES DE EMISIONES CONTAMINANTES LOCALES Y GLOBALES GENERADAS POR EL SECTOR TRANSPORTE EN PAÍSES DE AMÉRICA DEL SUR . Memoria para optar al título de Ingeniera Civil Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María. Repositorio institucional. https://repositorio.usm.cl/entities/tesis/12c6b171-88f7-457b-a9af-7e97e9683a6f.

[Cifuentes et al., 2025] Cifuentes, F., Eskes, H., Dammers, E., Bryan, C., and Boersma, F. (2025). Accurate space-based NO_x emission estimates with the flux divergence approach require fine-scale model information on local oxidation chemistry and profile shapes. *Geoscientific Model Development*, 18(3):621–649. https://doi.org/10.5194/gmd-18-621-2025.

[Cifuentes et al., 2026] Cifuentes, F., Eskes, H., Piters, A., Gomez, J., Douros, J., Pinardi, G., Friedrich, M. M., Dammers, E., Gebetsberger, M., and Boersma, K. F. (2026). Uncertainty assessment of tropomi no_2 over europe using ground-based remote sensing observations. *Atmospheric Measurement Techniques*, 19(7):2437–2477. https://amt.copernicus.org/articles/19/2437/2026/.

[Cooper et al., 2017] Cooper, M., Martin, R. V., Padmanabhan, A., and Henze, D. K. (2017). Comparing mass balance and adjoint methods for inverse modeling of nitrogen dioxide columns for global nitrogen oxide emissions. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 122(8):4718–4734. https://doi.org/10.1002/2016JD025985.

[Copernicus Sentinel-5P (processed by ESA), 2021] Copernicus Sentinel-5P (processed by ESA) (2021). Tropomi level 2 nitrogen dioxide total column products. version 02. European Space Agency. https://doi.org/10.5270/S5P-9bnp8q8.

[Dammers et al., 2024] Dammers, E., Tokaya, J., Mielke, C., Hausmann, K., Griffin, D., McLinden, C., Eskes, H., and Timmermans, R. (2024). Can TROPOMI NO_2 satellite data be used to track the drop in

and resurgence of NO_x emissions in Germany between 2019–2021 using the multi-source plume method (MSPM)? *Geoscientific Model Development*, 17(12):4983–5007. https://gmd.copernicus.org/articles/17/4983/2024/.

[Ding et al., 2017] Ding, J., van der A, R. J., Mijling, B., and Levelt, P. F. (2017). Space-based no_x emission estimates over remote regions improved in decso. *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(3):925–938. https://amt.copernicus.org/articles/10/925/2017/.

[Dix et al., 2022] Dix, B., Francoeur, C., Li, M., Serrano-Calvo, R., Levelt, P. F., Veefkind, J. P., McDonald, B. C., and de Gouw, J. (2022). Quantifying nox emissions from u.s. oil and gas production regions using tropomi no2. *ACS Earth and Space Chemistry*, 6(2):403–414. https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.1c00387.

[European Space Agency, 2020] European Space Agency (2020). Emisiones de NOx en Sudamérica (TROPOMI). https://www.temis.nl/emissions/region_samerica/datapage_nox.php. Accedido: 05-05-2026.

[Fernández, 2026] Fernández, J. (2026). Análisis y validación de datos satelitales de NO_2 troposférico y superficial para Chile en el periodo 2018-2024. Memoria para optar al título de Ingeniera Civil Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María. Repositorio institucional. https://repositorio.usm.cl/entities/tesis/02721dd7-33a9-480a-a342-436588297c8d.

[Hakkarainen et al., 2025] Hakkarainen, J., Ialongo, I., Oda, T., and Crisp, D. (2025). A Robust Method for Calculating Carbon Dioxide Emissions From Cities and Power Stations Using OCO-2 and S5P/TROPOMI Observations. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 130(9):e2025JD043358. https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2025JD043358.

[KNMI, 2026] KNMI (2026). TROPOMI NO2 data version overview. https://www.temis.nl/airpollution/no2col/tropomi_no2_data_versions.php. Accedido: 03-07-2026.

[Laughner and Cohen, 2019] Laughner, J. L. and Cohen, R. C. (2019). Direct observation of changing no_x lifetime in north american cities. *Science*, 366(6466):723–727. https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aax6832.

[Lorente et al., 2019] Lorente, A., Boersma, K. F., Eskes, H. J., van Geffen, J., de Zeeuw M.B., van der Gon H.A.C., D., S., B., and M.C., K. (2019). Quantification of nitrogen oxides emissions from build-up of pollution over Paris with TROPOMI. *Scientific Reports*, 9(20033). https://doi.org/10.1038/s41598-019-56428-5.

[Lotte, 2022] Lotte, B. (2022). The Flux Divergence Method Applied to Nitrogen Emissions in The Netherlands. Master's thesis, Delft University of Technology. https://repository.tudelft.nl/record/uuid:6e7e611b-9a7a-4886-8eb8-f1a172516d99. Accedido desde el Repositorio de TU Delft el 03-07-2026.

[Lu et al., 2022] Lu, X., Jacob, D. J., Wang, H., Maasakkers, J. D., Zhang, Y., Scarpelli, T. R., Shen, L., Qu, Z., Sulprizio, M. P., Nesser, H., Bloom, A. A., Ma, S., Worden, J. R., Fan, S., Parker, R. J., Boesch, H., Gautam, R., Gordon, D., Moran, M. D., Reuland, F., Villasana, C. A. O., and Andrews, A. (2022). Methane emissions in the united states, canada, and mexico: evaluation of national methane emission inventories and 2010–2017 sectoral trends by inverse analysis of in situ (globalviewplus CH_4 obspack) and satellite (gosat) atmospheric observations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 22(1):395–418. https://acp.copernicus.org/articles/22/395/2022/.

[Ministerio de Transportes y Telecomunicaciones de Chile, 2011] Ministerio de Transportes y Telecomunicaciones de Chile (2011). Estudio táctico de tarificación vial por congestión i etapa: Informe final. Technical report, Subsecretaría de Transportes, Unidad Operativa de Control de Tránsito (UOCT). Preparado por Steer Davies Gleave. https://www.subtrans.gob.cl/subtrans/doc/I%20Final%20Estudio%20Tactico%20TVC%20I%20Etapa.pdf. Accedido el: 10-08-2026.

[Ministerio del Medio Ambiente, 2024a] Ministerio del Medio Ambiente (2024a). Documento del inventario nacional de gases de efecto invernadero serie 1990-2022. Technical report, Gobierno de Chile. https://unfccc.int/sites/default/files/resource/2024_DIN_CL.pdf.

[Ministerio del Medio Ambiente, 2024b] Ministerio del Medio Ambiente (2024b). Sistema Nacional de Inventarios de Gases de Efecto Invernadero (SNI Chile) - Sector Energía . https://snichile.mma.gob.cl/sector-energia/.

[NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2016] NASA Applied Remote Sensing Training Program (2016). Introduction to satellite remote sensing for air quality applications. Curso remoto. https://www.earthdata.nasa.gov/learn/trainings/introduction-satellite-remote-sensing-air-quality-applications.

[NASA Applied Remote Sensing Training Program, 2025] NASA Applied Remote Sensing Training Program (2025). Arset - fundamentals of remote sensing. Curso remoto. https://www.earthdata.nasa.gov/learn/trainings/fundamentals-remote-sensing.

[Nawaz et al., 2023] Nawaz, M. O., Henze, D. K., Huneeus, N. J., Osses, M., Álamos, N., Opazo, M. A., and Gallardo, L. (2023). Sources of air pollution health impacts and co-benefits of carbon neutrality in Santiago, Chile. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 128(19):e2023JD038808. https://doi.org/10.1029/2023JD038808.

[Osses et al., 2021] Osses, M., Rojas, N., Ibarra, C., Valdebenito, V., Laengle, I., Pantoja, N., Osses, D., Basoa, K., Tolvett, S., Huneeus, N., Gallardo, L., and Gómez, B. (2021). High-definition spatial distribution maps of on-road transport exhaust emissions in chile, 1990-2020. *Mendeley Data, V2*. https://data.mendeley.com/datasets/z69m8xm843/2.

[Osses et al., 2022] Osses, M., Rojas, N., Ibarra, C., Valdebenito, V., Laengle, I., Pantoja, N., Osses, D., Basoa, K., Tolvett, S., Huneeus, N., Gallardo, L., and Gómez, B. (2022). High-resolution spatial-distribution maps of road transport exhaust emissions in chile, 1990-2020. *Earth System Science Data*, 14(3):1359–1376. https://essd.copernicus.org/articles/14/1359/2022/.

[Parra, 2017] Parra, R. (2017). Efecto fin de semana en la calidad del aire de la ciudad de cuenca, ecuador. *ACI Avances en Ciencias e Ingenierías*, 9(15):104–111. https://doi.org/10.18272/aci.v9i15.291.

[Patel et al., 2026] Patel, P. N., Gautam, R., and Omara, M. (2026). Space-based assessment of NOx emissions from global oil and gas fields: Bridging the gap in current emission inventories. *Remote Sensing of Environment*, 334:115229. https://doi.org/10.1016/j.rse.2025.115229.

[Pathak et al., 2009] Pathak, R. K., Wu, W. S., and Wang, T. (2009). Summertime $PM_{2.5}$ ionic species in four major cities of China: nitrate formation in an ammonia-deficient atmosphere. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9:1711–1722. https://acp.copernicus.org/articles/9/1711/2009/acp-9-1711-2009.html.

[Rey-Pommier et al., 2025] Rey-Pommier, A., Chevallier, F., Ciais, P., Christoudias, T., Kushta, J., Georgiou, G., Violaris, A., Dubart, F., and Sciare, J. (2025). Mapping NOx emissions in Cyprus using TROPOMI observations: evaluation of the flux-divergence scheme using multiple parameter sets. *Environmental Science and Pollution Research*, 32:1932–1951. https://doi.org/10.1007/s11356-024-35851-w.

[Rijsdijk et al., 2025] Rijsdijk, P., Eskes, H., Dingemans, A., Boersma, K. F., Sekiya, T., Miyazaki, K., and Houweling, S. (2025). Quantifying uncertainties in satellite no_2 superobservations for data assimilation and model evaluation. *Geoscientific Model Development*, 18(2):483–509. https://doi.org/10.5194/gmd-18-483-2025.

[St. Germain, 2025] St. Germain, K. (2025). Nasa's earth system observatory formulation progress. https://ntrs.nasa.gov/citations/20230013083. Accedido: 24-11-2025.

[TEMIS, 2026] TEMIS (2026). Tropospheric NO2 from satellites. https://www.temis.nl/airpollution/no2.php. Accedido: 03-07-2026.

[van der A et al., 2020] van der A, R., Stavrakou, J., Jean-François, M., Bauwens, M., and Ding, J. (2020). SOLFEO Proyect - Final Report. Technical report, Agencia Espacial Europea. https://eo4society.esa.int/wp-content/uploads/2021/02/SOLFEO_Final_Report_v1.1.pdf.

[Veefkind et al., 2012] Veefkind, J., Aben, I., McMullan, K., Förster, H., de Vries, J., Otter, G., Claas, J., Eskes, H., de Haan, J., Kleipool, Q., van Weele, M., Hasekamp, O., Hoogeveen, R., Landgraf, J., Snel, R., Tol, P., Ingmann, P., Voors, R., Kruizinga, B., Vink, R., Visser, H., and Levelt, P. (2012). Tropomi on the esa sentinel-5 precursor: A gmes mission for global observations of the atmospheric composition for climate, air quality and ozone layer applications. *Remote Sensing of Environment*, 120:70–83. The Sentinel Missions - New Opportunities for Science. https://doi.org/10.1016/j.rse.2011.09.027.

[Wang et al., 2023] Wang, J., Zhang, Y., Zhang, C., Wang, Y., Zhou, J., Whalley, L. K., Slater, E. J., Dyson, J. E., Xu, W., Cheng, P., Han, B., Wang, L., Yu, X., Wang, Y., Woodward-Massey, R., Lin, W., Zhao, W., Zeng, L., Ma, Z., Heard, D. E., and Ye, C. (2023). Validating HONO as an Intermediate Tracer of the External Cycling of Reactive Nitrogen in the Background Atmosphere. *Environmental Science & Technology*, 57:5474–5484. https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.est.2c06731.

[Yarce Botero et al., 2021] Yarce Botero, A., Lopez-Restrepo, S., Pinel Peláez, N., Quintero, O. L., Segers, A., and Heemink, A. W. (2021). Estimating nox lotos-euros ctm emission parameters over the northwest of south america through 4denvar tropomi no2 assimilation. *Atmosphere*, 12(12). https://www.mdpi.com/2073-4433/12/12/1633.

Anexo A

Observaciones satelitales

A.1. Descarga de datos

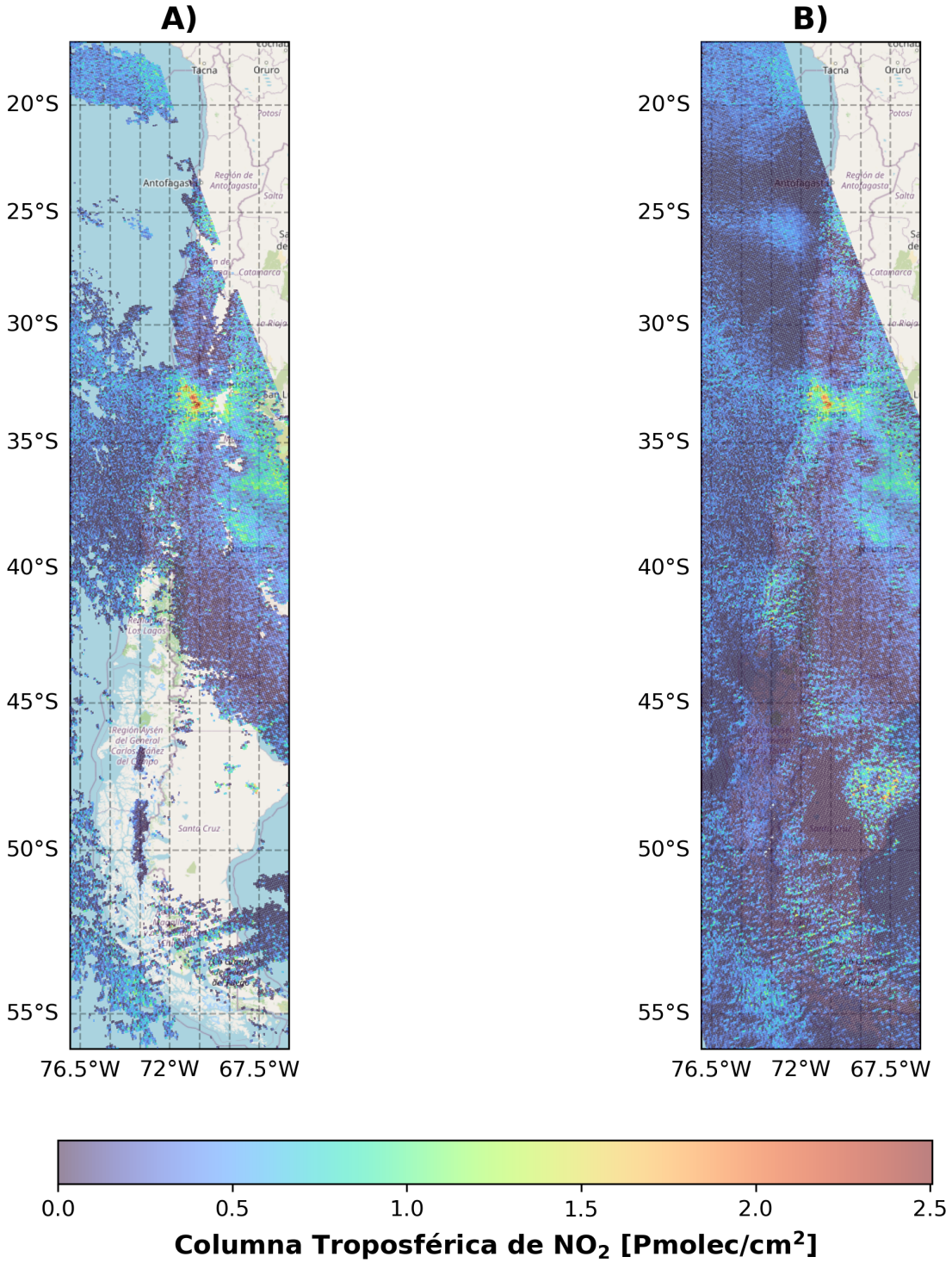


Figura A.1: Mapa de la columna troposférica de NO_2 de TROPOMI para el 1 de enero de 2019 en Chile continental: A) con filtro de calidad $qa > 0.75$ y B) sin filtro de calidad $qa > 0$.

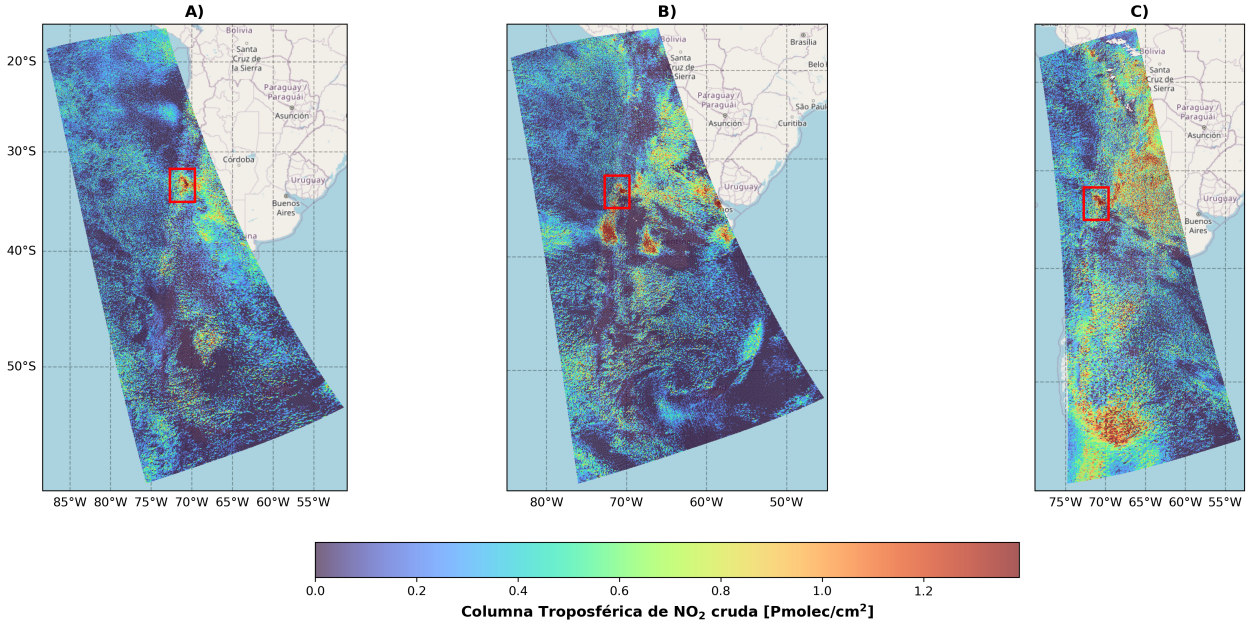


Figura A.2: Evidencia de las diferencias en los barridos orbitales de TROPOMI sobre el dominio de estudio (cuadro rojo). A): 1 de enero de 2019, B): 8 de enero de 2019, y C): 16 de enero de 2019.

Anexo B

Aplicación del modelo FDA

B.1. Componentes y resultados promediados mensualmente

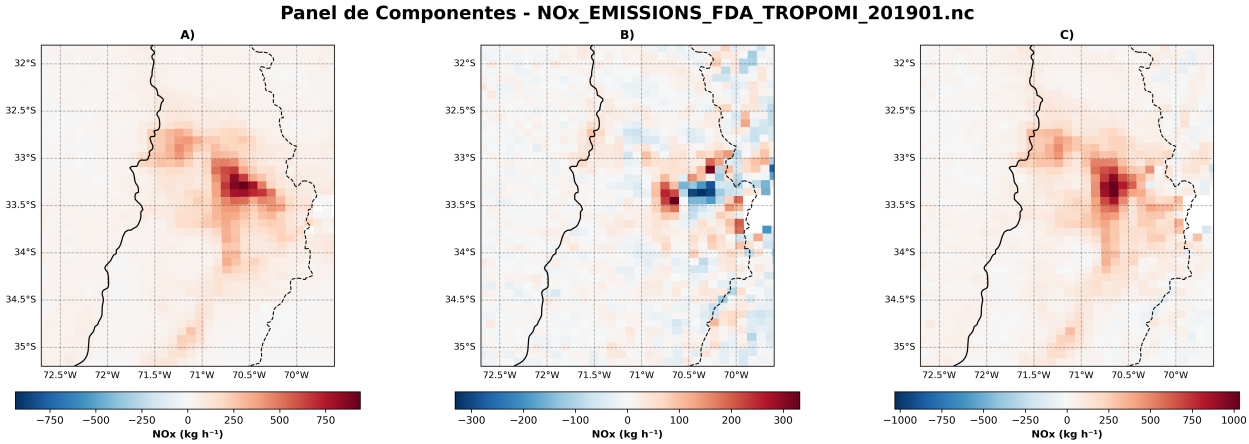


Figura B.1: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para enero de 2019.

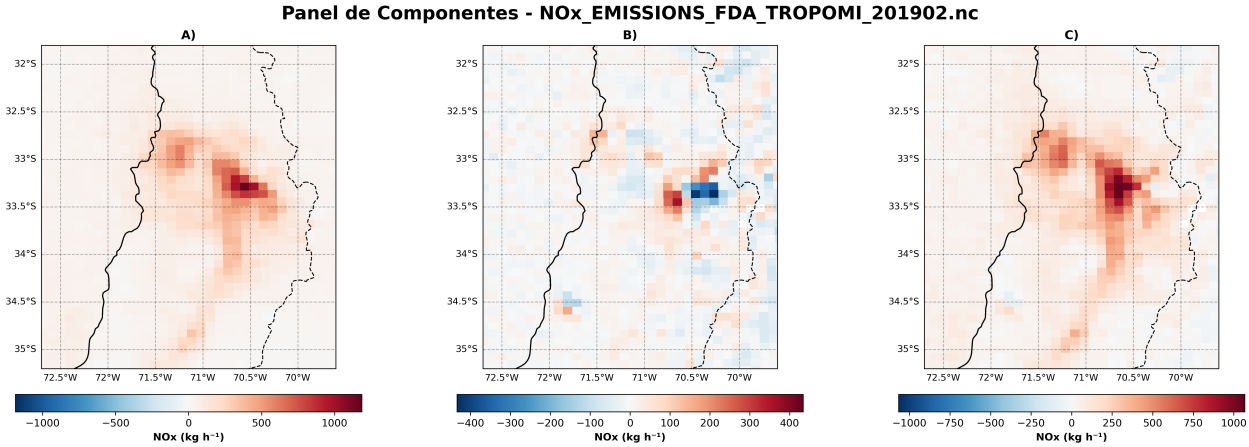


Figura B.2: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para febrero de 2019.

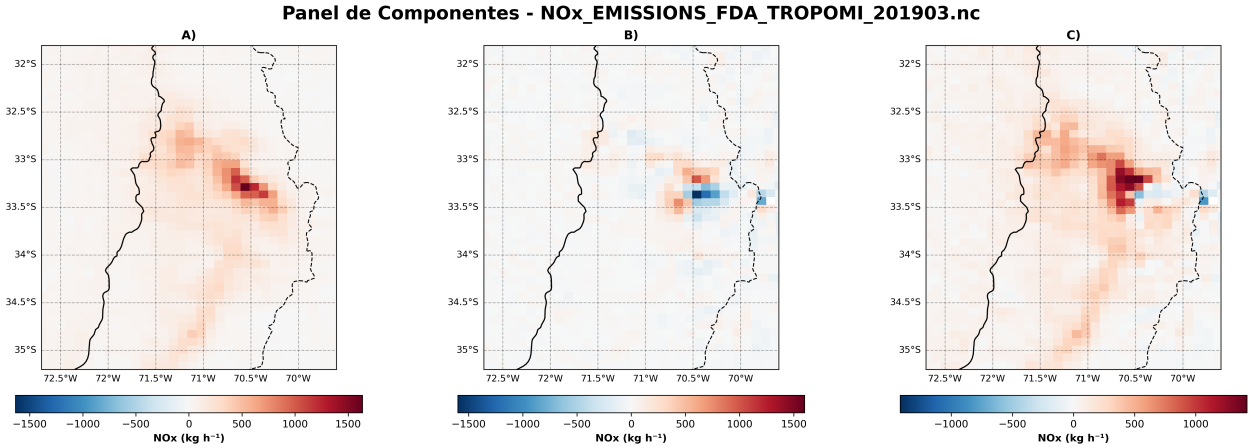


Figura B.3: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para marzo de 2019.

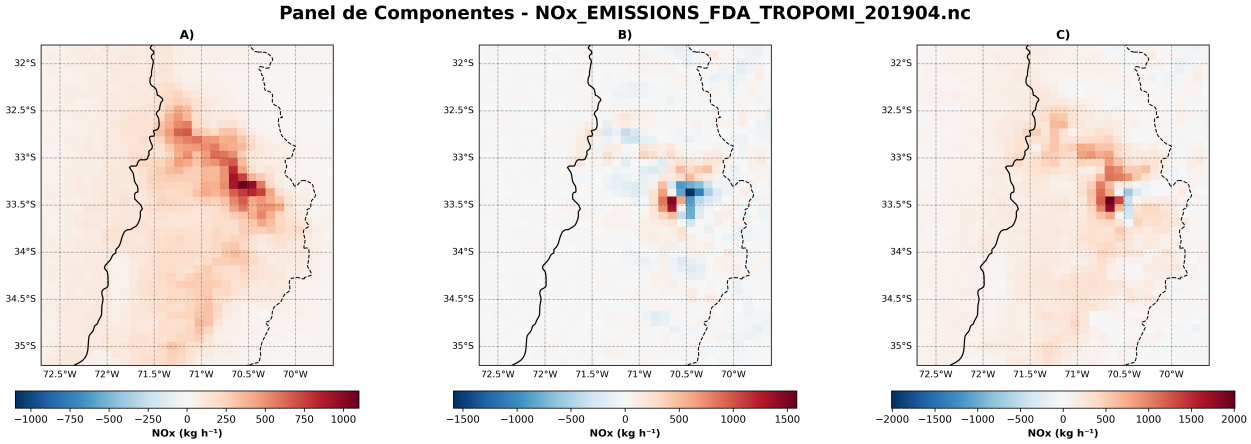


Figura B.4: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para abril de 2019.

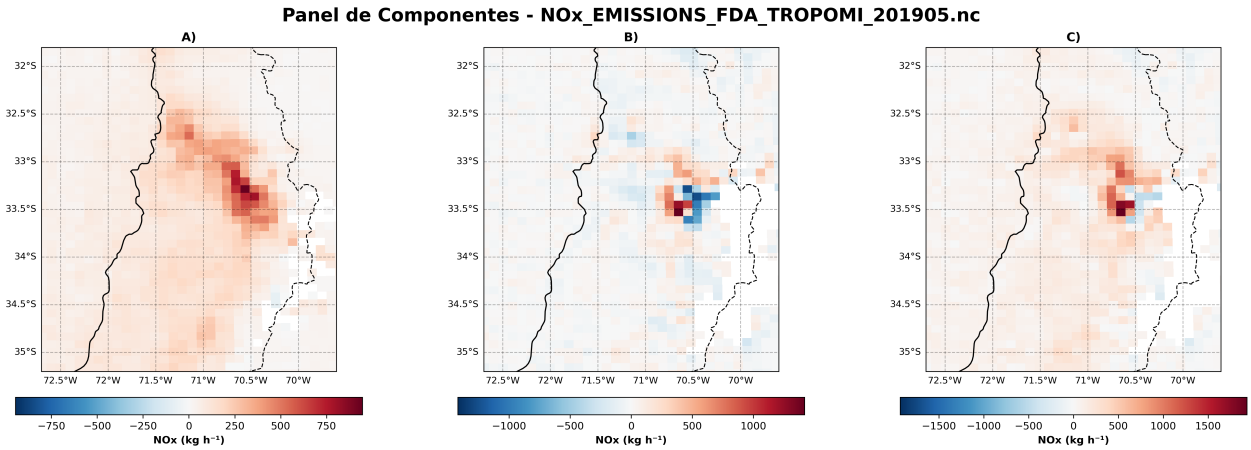


Figura B.5: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para mayo de 2019.

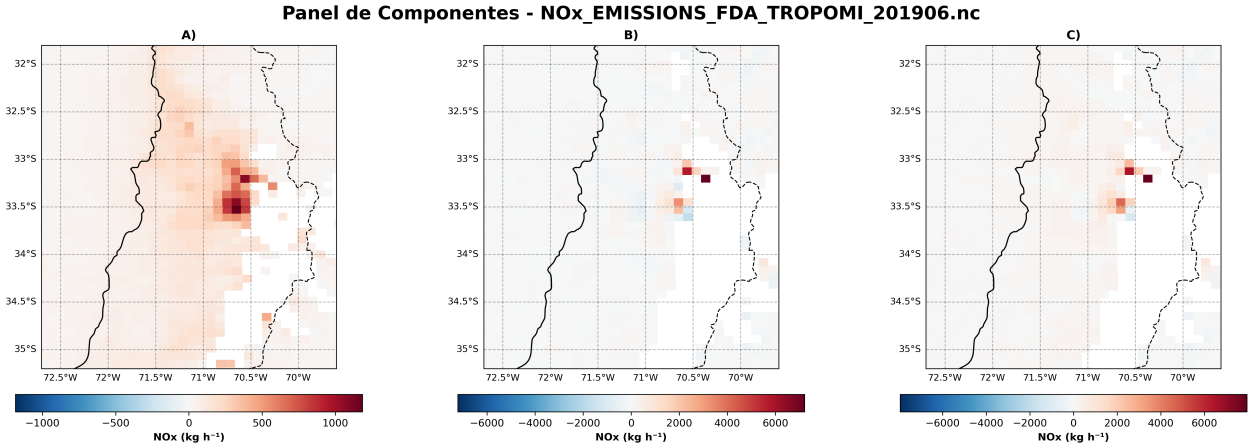


Figura B.6: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para junio de 2019.

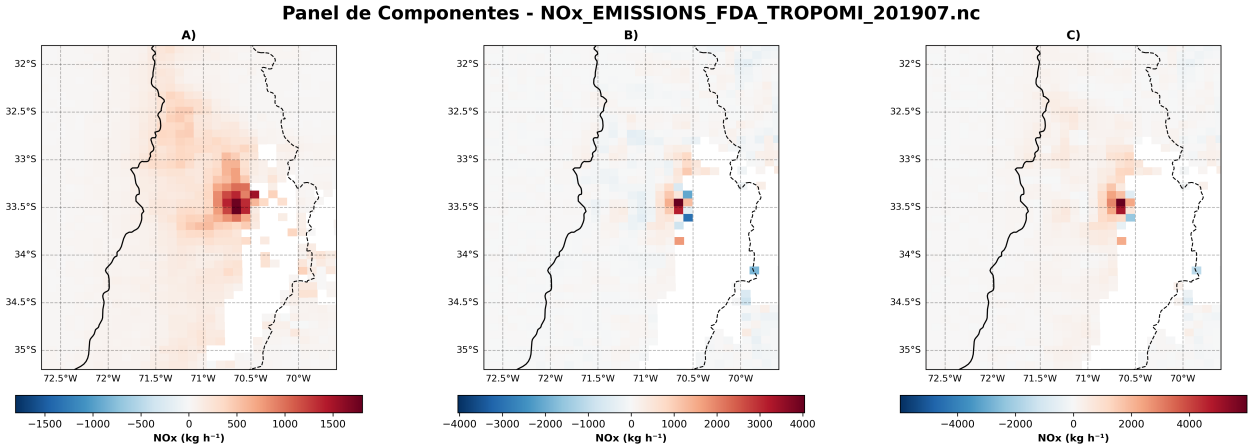


Figura B.7: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para julio de 2019.

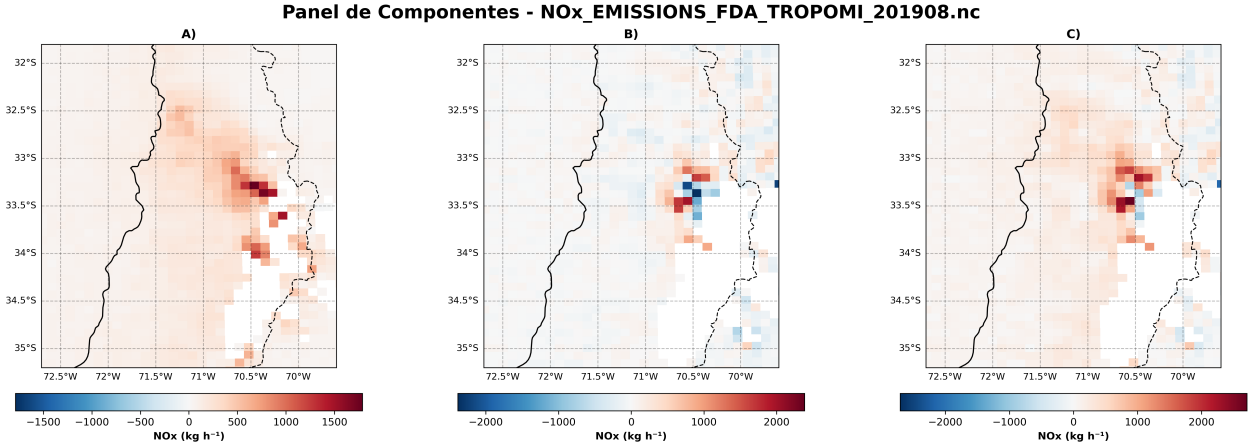


Figura B.8: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para agosto de 2019.

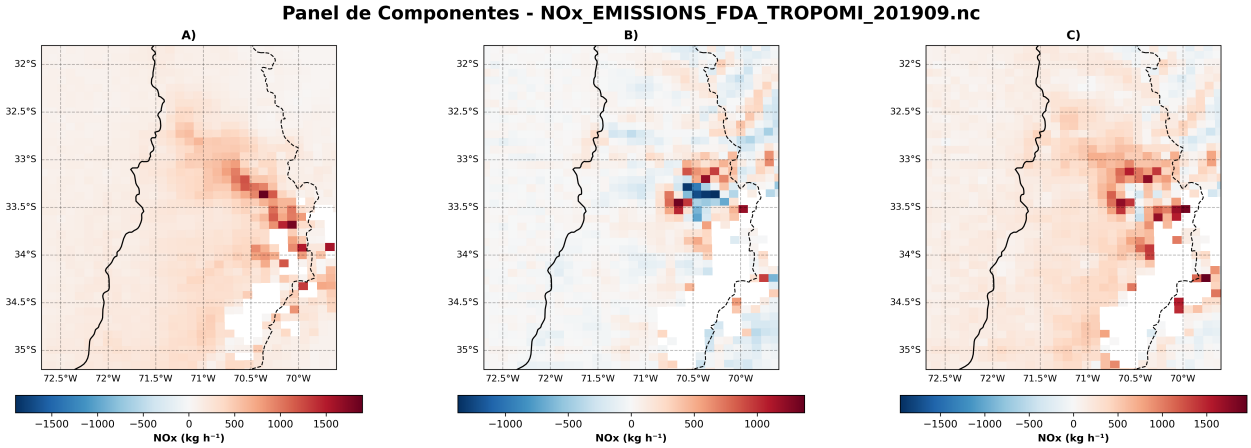


Figura B.9: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para septiembre de 2019.

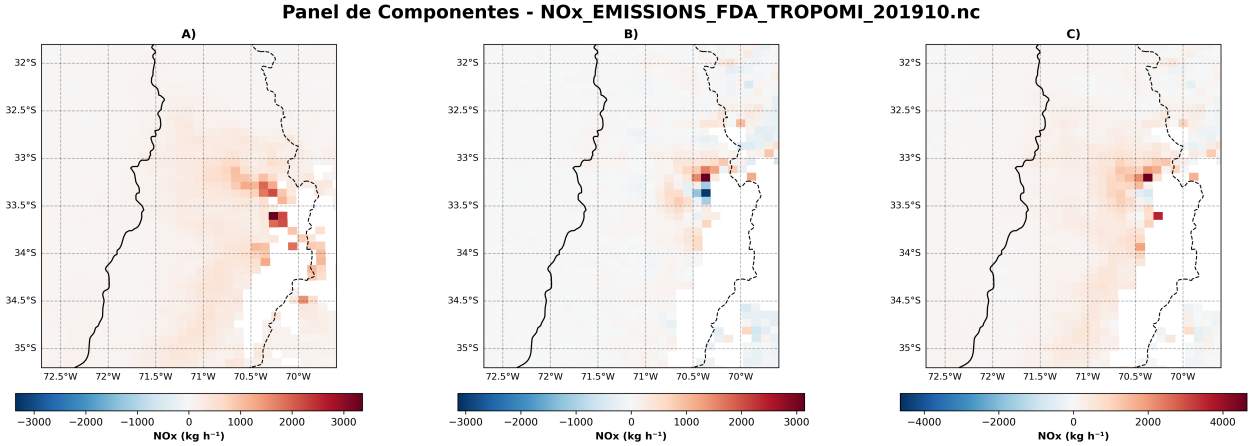


Figura B.10: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para octubre de 2019.

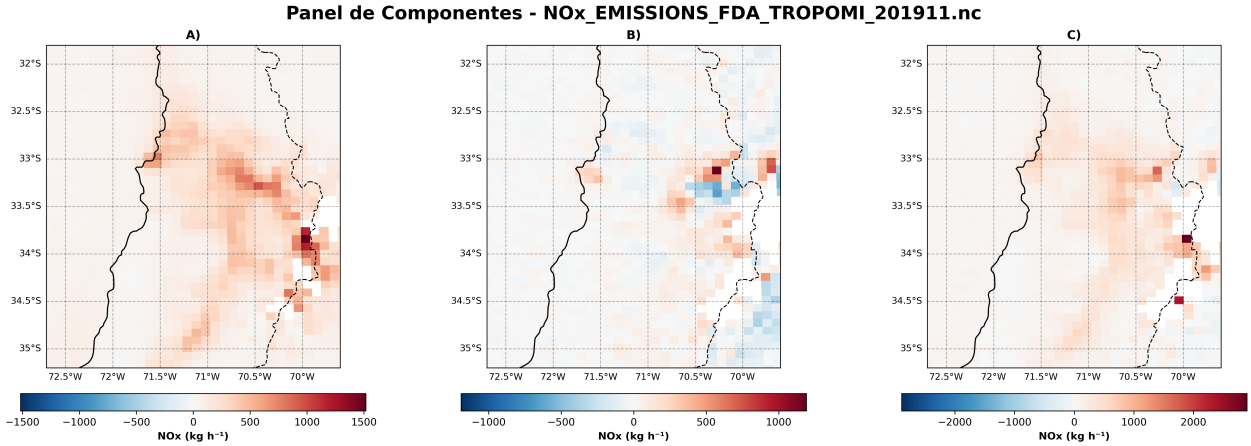


Figura B.11: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para noviembre de 2019.

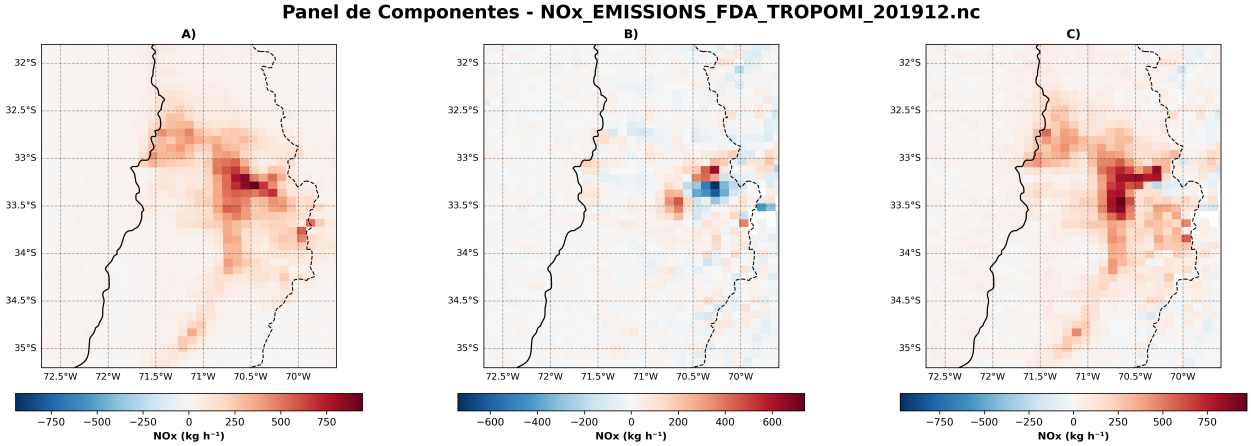


Figura B.12: Resultados promediados mensualmente del modelo FDA aplicado en Chile central para diciembre de 2019.

Anexo C

Intercomparación entre inventarios

C.1. Emisiones comunales de NO_x

Tabla C.1: Consolidado de emisiones estimadas (Gg/año) para todas las comunas de la Región Metropolitana.

Comuna	INEMA	TROPOMI	M. Caja	Dif. (T-I)	Dif. (C-I)	Dif. (T-C)
Alhué	0.09	3.69	0.08	3.60	−0.02	3.62
Buin	0.40	3.94	0.11	3.54	−0.29	3.83
Calera de Tango	0.06	1.95	0.00	1.89	−0.06	1.95
Cerrillos	1.68	1.14	0.00	−0.54	−1.68	1.14
Cerro Navia	0.14	0.46	0.00	0.31	−0.14	0.46
Colina	0.93	38.47	0.41	37.53	−0.52	38.06
Conchalí	0.36	0.52	0.00	0.15	−0.36	0.52
Curacaví	0.47	5.51	0.09	5.05	−0.38	5.42
El Bosque	0.27	0.81	0.12	0.54	−0.15	0.69
El Monte	0.15	1.44	0.04	1.30	−0.11	1.40
Estación Central	0.54	1.15	0.00	0.61	−0.54	1.15
Huechuraba	0.53	1.88	0.00	1.35	−0.53	1.88
Independencia	0.14	0.39	0.00	0.25	−0.14	0.39
Isla de Maipo	0.08	2.88	0.00	2.81	−0.08	2.88
La Cisterna	0.51	0.73	0.00	0.22	−0.51	0.73
La Florida	0.88	1.55	0.00	0.68	−0.88	1.55
La Granja	0.87	0.54	0.00	−0.32	−0.87	0.54
La Pintana	0.45	1.14	0.00	0.69	−0.45	1.14
La Reina	0.33	1.14	0.18	0.81	−0.15	0.95
Lampa	0.27	10.66	0.24	10.39	−0.03	10.42
Las Condes	1.01	1.68	0.06	0.67	−0.94	1.61
Lo Barnechea	0.63	17.72	0.35	17.09	−0.28	17.37
Lo Espejo	0.25	0.47	0.00	0.21	−0.25	0.47
Lo Prado	0.18	0.46	0.00	0.28	−0.18	0.46
Macul	0.29	0.78	0.00	0.49	−0.29	0.78
Maipú	1.65	5.04	0.00	3.39	−1.65	5.04
María Pinto	0.07	3.96	0.09	3.89	0.02	3.87
Melipilla	0.89	12.04	0.22	11.15	−0.67	11.82
Ñuñoa	0.76	1.32	0.00	0.56	−0.76	1.32
Padre Hurtado	2.12	1.84	0.12	−0.28	−2.00	1.72
Paine	0.63	11.23	0.17	10.60	−0.46	11.06

Continúa en la siguiente página...

Tabla C.1 – Continuación de la página anterior

Comuna	INEMA	TROPOMI	M. Caja	Dif. (T-I)	Dif. (C-I)	Dif. (T-C)
Pedro Aguirre Cerda	0.27	0.61	0.00	0.34	−0.27	0.61
Peñaflor	0.13	1.37	0.00	1.25	−0.13	1.37
Peñalolén	0.64	1.61	0.00	0.97	−0.64	1.61
Pirque	0.06	5.50	0.09	5.44	0.03	5.41
Providencia	0.60	0.95	0.00	0.35	−0.60	0.95
Pudahuel	1.13	6.20	0.13	5.07	−1.00	6.07
Puente Alto	1.37	0.61	0.14	−0.75	−1.22	0.47
Quilicura	1.65	2.97	0.00	1.33	−1.65	2.97
Quinta Normal	1.16	0.56	0.17	−0.60	−0.99	0.39
Recoleta	0.38	1.00	0.00	0.62	−0.38	1.00
Renca	0.95	1.46	0.00	0.52	−0.95	1.46
San Bernardo	1.78	4.89	0.00	3.11	−1.78	4.89
San Joaquín	0.26	0.70	0.00	0.44	−0.26	0.70
San José de Maipo	0.20	47.50	0.57	47.30	0.37	46.93
San Miguel	0.29	0.80	0.00	0.51	−0.29	0.80
San Pedro	0.24	4.29	0.08	4.05	−0.16	4.21
San Ramón	0.19	0.41	0.00	0.22	−0.19	0.41
Santiago	0.96	1.89	0.00	0.93	−0.96	1.89
Talagante	0.27	2.44	0.10	2.17	−0.17	2.34
Tiltil	3.42	15.96	0.15	12.54	−3.26	15.81
Vitacura	0.94	0.64	0.00	−0.30	−0.94	0.64

Tabla C.2: Consolidado de emisiones estimadas (Gg/año) para todas las comunas de la Región de Valparaíso.

Comuna	INEMA	TROPOMI	M. Caja	Dif. (T-I)	Dif. (C-I)	Dif. (T-C)
Algarrobo	0.13	1.21	0.02	1.08	−0.12	1.20
Cabildo	0.18	8.06	0.14	7.88	−0.05	7.92
Calera	2.56	0.94	0.06	−1.61	−2.50	0.89
Calle Larga	0.11	6.32	0.03	6.21	−0.08	6.29
Cartagena	0.10	1.86	0.02	1.75	−0.08	1.83
Casablanca	0.29	7.08	0.10	6.79	−0.19	6.98
Catemu	0.11	3.24	0.03	3.13	−0.08	3.21
Concón	1.58	1.19	0.04	−0.38	−1.54	1.15
El Quisco	0.08	0.31	0.01	0.23	−0.07	0.30
El Tabo	0.08	0.59	0.00	0.50	−0.08	0.59
Hijuelas	0.06	4.45	0.08	4.39	0.03	4.36
La Cruz	0.06	1.66	0.04	1.60	−0.02	1.61
La Ligua	0.23	10.10	0.16	9.87	−0.07	9.94
Limache	0.27	5.69	0.04	5.43	−0.22	5.65
Llaillay	0.33	7.48	0.04	7.15	−0.29	7.44
Los Andes	0.51	13.48	0.09	12.97	−0.42	13.39
Nogales	0.11	6.43	0.08	6.33	−0.03	6.35
Olmué	0.15	3.60	0.03	3.45	−0.12	3.56
Panquehue	0.14	1.70	0.07	1.55	−0.07	1.62
Papudo	0.06	1.57	0.03	1.51	−0.03	1.54
Petorca	0.08	4.59	0.10	4.51	0.01	4.49
Puchuncaví	3.66	4.70	0.08	1.04	−3.58	4.62
Putaendo	0.20	5.74	0.10	5.54	−0.10	5.65
Quillota	1.16	6.51	0.10	5.35	−1.06	6.41
Quilpué	1.23	6.55	0.12	5.33	−1.10	6.43
Quintero	0.28	2.08	0.04	1.80	−0.24	2.04
Rinconada	0.07	2.79	0.04	2.72	−0.03	2.76
San Antonio	0.35	2.63	0.06	2.28	−0.29	2.57
San Esteban	0.23	6.15	0.12	5.92	−0.11	6.03
San Felipe	0.27	2.36	0.06	2.09	−0.21	2.31
Santa María	0.06	1.80	0.00	1.74	−0.06	1.80
Santo Domingo	0.15	1.83	0.04	1.69	−0.11	1.80
Valparaíso	2.70	3.60	0.07	0.90	−2.63	3.53
Villa Alemana	0.84	1.86	0.04	1.01	−0.80	1.81
Viña del Mar	2.70	1.95	0.00	−0.74	−2.70	1.95
Zapallar	0.15	3.61	0.06	3.46	−0.09	3.55

C.2. Series de tiempo de la variabilidad diaria de emisiones de NOx en los tres puntos de interés

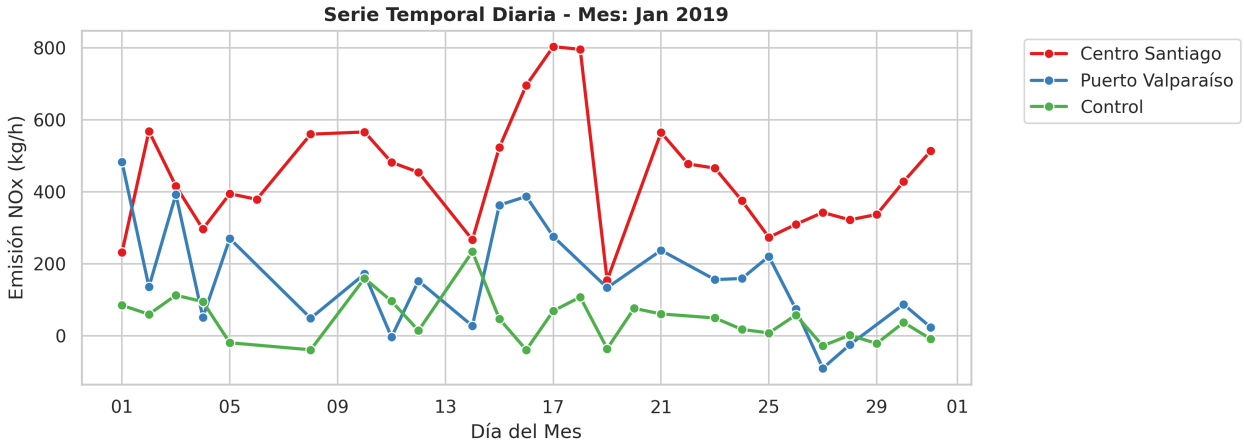


Figura C.1: Evolución temporal de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante enero de 2019 en 3 puntos de interés analizados

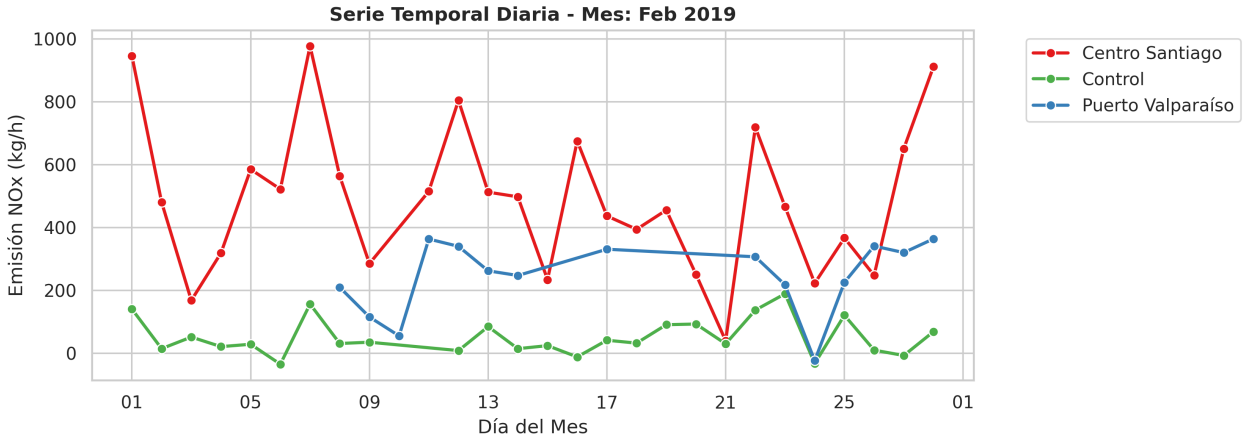


Figura C.2: Evolución temporal de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante febrero de 2019 en 3 puntos de interés analizados

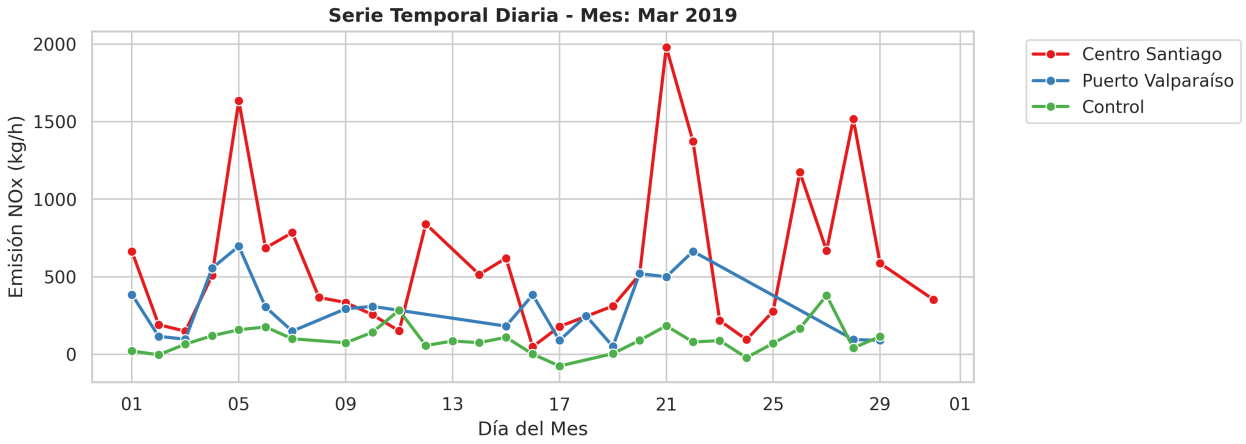


Figura C.3: Evolución temporal de las emisiones netas diarias de NO_x (kg/h) estimadas mediante FDA-TROPOMI durante marzo de 2019 en 3 puntos de interés analizados.