

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA

INSTITUTO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA Y CAMBIO CLIMÁTICO

CAMPO V. CIENCIAS ATMOSFÉRICAS, ESPACIALES Y PLANETARIAS

ESTUDIO SOBRE EL TRANSPORTE DE PARTÍCULAS PM_{2.5} ENTRE LAS CUENCAS ATMOSFÉRICAS DE LOS VALLES DE MÉXICO Y TOLUCA DURANTE EL PROYECTO: CCA-PT17

> **TESIS** QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

MAESTRA EN CIENCIAS DE LA TIERRA

PRESENTA: ANA KAREN PORTILLO SÁNCHEZ

TUTOR:

RICARDO TORRES JARDÓN INSTITUTO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA Y CAMBIO CLIMÁTICO

COMITÉ TUTOR: ARON JAZCILEVICH DIAMANT OSCAR AUGUSTO PERALTA ROSALES INSTITUTO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA Y CAMBIO CLIMÁTICO

Ciudad Universitaria, CD MX, ABRIL 2022



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

CÓDIGO DE ÉTICA

Declaro conocer el Código de Ética de la Universidad Nacional Autónoma de México, plasmado en la Legislación Universitaria. Con base en las definiciones de integridad y honestidad ahí especificadas, aseguro mediante mi firma al calce que el presente trabajo es original y enteramente de mi autoría.

Todas las citas de, o referencias a la obra de otros autores aparecen debida y adecuadamente señaladas, así como acreditadas mediante los recursos editoriales convencionales.

Ana Karen Portillo Sánchez

DEDICATORIAS

A mis padres, hermanas y sobrinos, sin importar si los momentos son buenos o malos me dan fuerza y cariño para seguir día a día.

A mis amigas, quienes desde la distancia siempre están ahí siendo un rayito de esperanza.

A mi compañero, por su apoyo y compañía y por hacer la pandemia menos terrible.

A mis perritos.

AGRADECIMIENTOS

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT -México) por la beca otorgada para estudios de posgrado con CVU 927797.

Al Instituto de Ciencias de la Atmósfera y Cambio Climático de la UNAM (ICAyCC-UNAM) y al Posgrado en Ciencias de la Tierra por los espacios concedidos para la realización de actividades de investigación y académicas relacionadas a los estudios de maestría, así como por ser el ambiente propicio para actividades culturales, recreativas y de crecimiento personal.

Al Dr. Ricardo Torres Jardón, quien, con su acertada actividad de tutoría acompañada siempre de su excelente calidad humana, empatía y disposición de compartir conocimientos ha sido y será una guía invaluable durante los estudios de maestría, la realización de este trabajo y actividades futuras.

A los miembros del Comité Tutor y Jurado Evaluador, por su guía y aportes de gran valor para este trabajo:

- Dr. Aron Jazcilevich Diamant (ICAyCC-UNAM)
- Dr. Oscar Augusto Peralta Rosales (ICAyCC -UNAM)
- Dra. Elizabeth Vega Rangel (ICAyCC -UNAM)

• Dr. Alberto Mendoza Dominguez (Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey-ITESM)

Al Dr. Agustín García Reynoso (ICAyCC -UNAM) por su invaluable apoyo en la generación de trayectorias con el software GRADS, así como por facilitar las bases de datos de WRF-Chem del centro del país para el periodo de estudio del presente trabajo.

A la M. en C. Bertha Mar Morales, por su disposición y apoyo en la elaboración de mapas de trayectorias promedio por conglomerado de los sitios de monitoreo objeto de este trabajo.

Al Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) y al Ing. Raúl Ramírez Suárez, por proporcionarnos las bases de datos de velocidad y dirección del viento de los años 2016-2017 generados en la torre meteorológica del ININ.

Al Lic. Ramiro Vivanco Chedraui por su apoyo económico crucial para el inicio y conclusión de este trabajo.

A mis compañeros del ICAyCC-UNAM, sin quienes la estancia en este centro de investigación no habría sido tan gratificante.

RESUMEN

La contaminación atmosférica en el centro de México, especialmente por partículas suspendidas representa un problema mayor, tanto en la Zona Metropolitana del Valle de Toluca como en la Zona Metropolitana del Valle de México. Los estudios referentes al potencial de transporte e intercambio de partículas entre las cuencas atmosféricas son pocos y se han enfocado en PM₁₀, por lo que el objetivo de este estudio fue identificar patrones de transporte de PM_{2.5} entre estas cuencas atmosféricas a través de la aplicación de análisis de clúster de trayectorias de retroceso . Para este fin se utilizaron datos de monitoreo de tres estaciones representativas: San Mateo Atenco (SM) ubicada en el Valle de Toluca, Santa Fe (SFE) localizada en el Valle de México e ININ sobre la Sierra de las Cruces (SC) la cuál separa a ambos valles.

Se identificaron las concentraciones promedio horarias máximas de PM_{2.5} y a partir de estos datos se construyeron las respectivas retro-trayectorias. El periodo de estudio abarcó del 15 de febrero al 14 de marzo de 2017, correspondiente a la campaña denominada CCAPT-17. Se encontró que ocurrió transporte regional advectivo dominante de masas de aire desde Huehuetoca y Tula ubicadas al N y NE del Valle de México hacia la zona urbana de Cuautitlán, Tlalnepantla, prosiguiendo hacia la porción oriental del pie de monte de la Sierra de las Cruces para pasar sobre SFE, cruzar por pasos de montaña hacia el ININ e incluso llegar a SM o hacia el sureste del Valle de Toluca.

También se encontró que, dentro de los valles se conformaron conglomerados de trayectorias de recirculación de masas de aire que fueron asociados a emisiones locales y fuentes aledañas, así como a contribuciones de $PM_{2.5}$ de transporte regional. Se confirmó la posibilidad de intercambio entre cuencas por la Sierra de las Cruces a través de los pasos de montaña ubicados entre la población de Salazar, el Cerro la Campana y el Cerro San Miguel.

Los resultados encontrados para los sitios de intercambio de $PM_{2.5}$ en este estudio coinciden parcialmente con lo identificado para PM_{10} por Chuquer-Sola en 2014.

Índias	6
	0
Indice de Figuras	8
Índice de Tablas	11
CAPÍTULO 1 Introducción	12
Planteamiento del Problema	13
Justificación	17
Hipótesis	18
Objetivo general	18
Objetivos específicos	19
CAPÍTULO 2 Antecedentes	20
2.1 Contaminación por partículas suspendidas en México	20
2.2 Descripción de las zonas de estudio	22
2.2.1 Zona Metropolitana del Valle De México (ZMVM)	22
2.2.2 Zona Metropolitana del Valle De Toluca (ZMVT)	24
2.2.3 Orografía intercuenca	25
2.2.4 Contaminación por PM2.5 en la ZMVM y ZMVT	27
2.3 Intercambio de emisiones contaminantes entre cuencas atmosféricas de la	20
Megalopolis del Centro de Mexico	29
2.4 Origen y formación de las partículas atmosféricas	31
2.4.1 Distribución de tamaños y modas de acumulación de partículas	33
2.5 Análisis de trayectorias de retroceso	35
2.5.1 Análisis de Clúster	37
2.6 Ubicación de estaciones de monitoreo de estudio	38
CAPÍTULO 3 Materiales y Métodos	41
3.1 Recuperación de datos crudos de monitoreo	41
3.2 Limpieza, verificación y validación de datos	42
3.3 Análisis exploratorio de datos	43
3.4 Generación de trayectorias de retroceso con GrADS (Grid Analysis and Displa	y
System)	43

ÍNDICE

3.5 Análisis de trayectorias	46
3.6 Análisis de clúster	46
3.6.1 Pruebas estadísticas	
CAPÍTULO 4 Resultados y Discusión	
4.1 Limpieza, verificación y validación de datos	
4.2 Análisis exploratorio de datos	
4.2.1 Cumplimiento normativo	
4.2.2 Comportamiento temporal	
4.3 Análisis de trayectorias de retroceso	70
4.4 Análisis de Clúster	74
4.4.1 San Mateo Atenco (SM)	
4.4.2 Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ)	
4.4.3 Santa Fe (SFE)	
Conclusiones	
ANEXOS	
ANEXO A1. Limpieza, verificación y validación de datos	
ANEXO A2. Estadística básica, series de tiempo anuales de PM10 y rosas de v	viento
anuales	
ANEXO A3. Meteorología sinóptica	102
ANEXO A4. Generalidades de cálculo con GrADS	108
Referencias Bibliográficas	110

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Estados que conforman la Comisión Ambiental de la Megalópolis (CAMe) de la Zona Metropolitana del Valle de México
Figura 1.2. Porcentaje anual de días de incumplimiento a la NOM para PM_{10} (izquierda) y $PM_{2.5}$ (derecha) en 24 horas para la ZMVM y la ZMVT entre 1998 y 2016 para PM_{10} y para 2003 a 2016 para $PM_{2.5}$, cuando se tuvieron datos disponibles
Figura 2.1. Delimitación geográfica de la ZMVM mostrando rosas de viento para cuatro sitios representativos del área urbana
Figura 2.2. Delimitación geográfica de la ZMVT mostrando la rosa de vientos para el centroide del área urbana que está mostrada en color gris obscuro
Figura 2.3. Localización de la Sierra de las Cruces, los cerros que la integran y de las tres estaciones de monitoreo empleadas en este estudio SM-San Mateo Atenco, ININ-Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares y SFE-Santa Fe
Figura 2.4 Mapas de densidad de trayectorias de parcelas de aire de 24 horas hacia delante (forward) con origen en: (a) Toluca y, (b) Ciudad de México29
Figura 2.5 Esquema idealizado de la distribución normalizada de partículas en la atmósfera en forma de modas de frecuencia de acuerdo con su tamaño y a otros parámetros utilizados para su cuantificación (número, N; masa, M; volumen, V; área de superficie, S)
Figura 3.1. Metodología general del trabajo41
Figura 3.2. Diagrama de flujo de generación de archivo de trayectorias de retroceso44
Figura 3.3. Ejemplo de archivo .csv de trayectorias acondicionado para su procesamiento en <i>openair</i>
Figura 3.4. Diagrama de flujo del procedimiento de análisis de clúster realizado en este trabajo
Figura 3.5. Ejemplo de archivo .csv de contaminantes acondicionado para su procesamiento en <i>openair</i>
Figura 3.6. Ejemplo de dendograma obtenido con el método de Ward, y distancia euclidiana
Figura 4.1. Series de tiempo de promedios horarios PM _{2.5} para el año 2017 en las estaciones SM (a), ININ (b) y SFE (c)
Figura 4.2. Evaluación de cumplimiento de la NOM para PM _{2.5} en promedio de 24h para el año 2017 en las estaciones SM (a), ININ (b) y SFE (c)

Figura 4.3. Perfiles horarios de PM _{2.5} en rojo (a) y Velocidad del Viento (VV) en verde (b) para SM para el año 2017
Figura 4.4. Perfiles horarios de PM _{2.5} en rojo (a) y Velocidad del Viento (VV) en verde (b) para ININ para el año 2017
Figura 4.5. Perfiles horarios de PM _{2.5} en rojo (a) y Velocidad del Viento (VV) en verde (b) para SFE para el año 2017
Figura 4.6 Perfil horario de concentraciones de PM _{2.5} (a), O ₃ (b) y CO (c) para el periodo de 2017 en SM
Figura 4.7 Perfil horario de concentraciones de PM _{2.5} (a), O ₃ (b) y CO (c) para el periodo de 2017 en ININ
Figura 4.8 Perfil horario de concentraciones de PM _{2.5} (a), O ₃ (b) y CO (c) para el periodo de 2017 en SFE
Figura 4.9. Perfil semanal de PM _{2.5} para SM (rosa), ININ (verde) y SFE (azul) para 2017
Figura 4.10. Comportamiento de dirección y velocidad del viento y para el periodo de CCA-PT17 para SM, ININ y SFE
Figura 4.11. Representación geoespacial de las trayectorias de retroceso de 8h de duración que arribaron al sitio de monitoreo SM, generadas con GrADS a partir de los máximos diarios del periodo de 15 de febrero-14 de marzo de 201771
Figura 4.12. Representación geoespacial de las trayectorias de retroceso de 8h de duración que arribaron al sitio de monitoreo ININ, generadas con GrADS a partir de los máximos diarios del periodo de 15 de febrero-14 de marzo de 201772
Figura 4.13. Representación geoespacial de las trayectorias de retroceso de 8h de duración que arribaron al sitio de monitoreo SFE, generadas con GrADS a partir de los máximos diarios del periodo de 15 de febrero-14 de marzo de 201773
Figura 4.14. Dendograma correspondiente a la aplicación del método de Ward a las coordenadas del recorrido de las trayectorias de retroceso con arribo al sitio SM75
Figura 4.15. Dendograma correspondiente a la aplicación del método de Ward a las coordenadas del recorrido de las trayectorias de retroceso con arribo al sitio ININ76
Figura 4.16. Dendograma correspondiente a la aplicación del método de Ward a las coordenadas del recorrido de las trayectorias de retroceso con arribo al sitio SFE
Figura 4.17. Clúster de trayectorias de retroceso de 8h para el sitio SM con trayectorias promedio al centro, trayectorias que integran cada clúster a los lados y en la parte inferior gráficas de caja y bigote de las concentraciones asociadas a los máximos horarios de PM _{2.5} por clúster de (a) PM _{2.5} , (b) CO y (c) O ₃ 81

Figura 4.18. Clúster de trayectorias de retroceso de 8h para el sitio ININ con trayectorias promedio al centro, trayectorias que integran cada clúster a los lados y en la parte inferior gráficas de caja y bigote de las concentraciones asociadas a los máximos horarios de PM _{2.5} por clúster de (a) PM _{2.5} , (b) CO y (c) O ₃
Figura 4.19. Clúster de trayectorias de retroceso de 8h para el sitio SFE con trayectorias promedio al centro, trayectorias que integran cada clúster a los lados y en la parte inferior gráficas de caja y bigote con de las concentraciones asociadas a los máximos horarios de PM _{2.5} por clúster de (a) PM _{2.5} , (b) CO y (c) O ₃
Figura A1.1 Proceso de limpieza, validación y verificación de datos de PM _{2.5} y PM ₁₀
Figura A1.2 Proceso de limpieza, validación y verificación de datos de velocidad y dirección de viento
Figura A2.1 Series de tiempo de promedios horarios PM ₁₀ para el año 2017 en las estaciones SM (a), ININ (b) y SFE (c), la zona enmarcada en amarillo muestra el periodo de la campaña de monitoreo CCA-PT17
Figura A2.2 Rosas de viento anuales por estación de monitoreo, se incluyen los porcentajes de calmas consideradas a partir de 0.4 ms ⁻¹
Figura A3.1 Mapas de Analísis de Superficie de las 18:00 UTC (12:00 hora local) de Norte América para el periodo de CCA-PT17
Figura A4.1 Esquema general del movimiento de una partícula simulado por GRADS para generar la trayectoria de retroceso
Figura A4.2. Diagrama de flujo de la obtención de trayectorias que realiza el script traj.gs

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2.1. Normas Oficiales Mexicanas (NOM) y límites máximos permisibles decontaminantes criterio
Tabla 2.2 Características de las estaciones de monitoreo de estudio
Tabla 3.1 Campos y columnas necesarias en un archivo de trayectorias .csv para ser procesado por el paquete <i>openair</i>
Tabla 3.2 Campos y columnas necesarias en un archivo de contaminantes .csv para serprocesado por el paquete <i>openair</i>
Tabla 4.1 Estadística descriptiva de parámetros horarios de PM _{2.5} y velocidad del viento medidos por estación durante el periodo de la campaña CCA-PT1753
Tabla 4.2 Resumen de cumplimiento en SM, ININ, SFE de NOM-025 SSA1-2014 parael 2017
Tabla 4.3 Resumen de estadísticas de los clústeres generados por sitio durante el periodode CCA-PT17 para PM2.5
Tabla A2.1 Estadística descriptiva de parámetros horarios medidos por estación demonitoreo durante 2017
Tabla A2.2 Estadística descriptiva de parámetros horarios medidos por estación duranteCCA-PT17
Tabla A3.1 Fechas de máximos de PM2.5 por sitio en UTC y su pertenencia a losdiferentes conglomerados107

CAPÍTULO 1 INTRODUCCIÓN

La contaminación debida a partículas en México es un tema que ha cobrado una mayor importancia debido principalmente a los efectos que tiene en la salud de las personas. Los principales sitios afectados por esta problemática son las ciudades que conjugan gran cantidad de fuentes de emisión, con un medio físico que afecta la dispersión de los contaminantes y una enorme población que puede ser susceptible a un daño en su salud. Aunado a lo anterior, la dinámica de la atmósfera hace que algunos de estos sitios también sean afectados por emisiones ajenas a ellos que son transportadas por las masas de aire que arriban a estas regiones. Tal es el caso de las zonas metropolitanas del Valle de México y Toluca, donde se ha identificado una problemática en cuanto a PM_{2.5} y PM₁₀ que en los últimos años no ha logrado aminorarse a pesar de las medidas implementadas por el gobierno (SEMARNAT, 2017). Se ha inferido que las cuencas atmosféricas donde se asientan estas ciudades intercambian contaminantes y este transporte puede ocurrir a través de la Sierra de las Cruces, formación geológica que las separa (Chuquer-Sola, 2014).

Ambas metrópolis se asientan en estados que forman parte de la Megalópolis del Centro de México, cuyo PROAIRE las abarca en conjunto con las otras 5 entidades federativas vecinas que la forman (Figura 1.1). Es justo este documento el que menciona que debido al tamaño de las fuentes establecidas en estas entidades es de vital importancia caracterizar el transporte de contaminantes del aire que se da entre ellas (SEMARNAT, 2017). El presente trabajo aborda la parte correspondiente al transporte a escala regional de PM_{2.5} que pudiera ocurrir entre las cuencas atmosféricas del Valle de Toluca y Valle de México a través de la Sierra de las Cruces. Para este fin se utilizaron datos de PM_{2.5} en tres estaciones representativas: San Mateo Atenco (SM), ININ y Santa Fe (SFE), durante el periodo de 15 de febrero al 14 de marzo de 2017, periodo de la campaña de monitoreo intensiva del proyecto "Impacto de las emisiones móviles y fijas a la distribución de carbono negro y gases contaminantes en la vertical en zonas urbanas y periurbana del centro de México" (CCA-PT17).

Esta tesis está integrada por: Capitulo 1 donde se exponen la problemática que este estudio pretende abordar, así como sus objetivos, hipótesis y justificación, en el capítulo 2, donde se presentan los antecedentes que permitirán retomar conceptos importantes para la realización y compresión de este trabajo, continuando en el capítulo 3 con los materiales y métodos usados desde la obtención de los datos de las tres estaciones de trabajo, pasando por el análisis exploratorio de los datos, la generación de indicadores de comportamiento temporal y cumplimento normativo, la generación de retro-trayectorias y el análisis de clúster de trayectorias. En el capítulo 4 se muestran y discuten los resultados derivados de

la aplicación de los métodos antes expuestos y se presenta la interpretación de los conglomerados de trayectorias generados y su papel en la identificación de patrones de transporte de $PM_{2.5}$ entre las cuencas de interés. Finalmente se presentan las conclusiones y bibliografía consultada.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Se estima que el 90% de la población mundial se encuentra expuesta a concentraciones crónicas por encima del nivel promedio anual de 10 μ g m⁻³ de PM_{2.5} sugerido por la Organización Mundial de la Salud (WHO, 2018), siendo las comunidades urbanas las que reciben un mayor impacto debido a que concentran gran cantidad de población. En este sentido tan sólo en México, desde 1990 las ciudades reúnen más del 70% de la población del país (INEGI, 2020). El caso específico de la corona regional del centro de México que se ha desarrollado en torno a la capital del país y se ha denominado Megalópolis de México, está conformada por la Ciudad de México, el Estado de México y los estados de Hidalgo, Puebla, Morelos, Querétaro y Tlaxcala (Figura 1.1), donde se estima que la población bajo la influencia de la contaminación del aire es de poco más de 25 millones de habitantes.



Figura 1.1. Estados que conforman la Comisión Ambiental de la Megalópolis (CAMe) de la Zona Metropolitana del Valle de México. (Tomado de ProAire de la Megalópolis 2017-2030).

Es muy factible que la calidad del aire de una zona urbana no sólo sea responsabilidad de las emisiones generadas localmente, sino que es altamente posible que emisiones y/o la

pluma de contaminación sean transportadas por el viento llegando a impactar y a sumarse al problema local de contaminación del aire de dicha metrópoli. Es tan importante esta interacción de las ciudades del centro del país que recientemente se estableció la Comisión Ambiental Metropolitana (SEMARNAT, 2017), que posteriormente se denominaría Comisión Ambiental de la Megalópolis (CaMe), entre el Gobierno Federal y los gobiernos locales para abordar de manera integral los aspectos comunes al medio ambiente de esta región. En esta Comisión están representadas todas las entidades que conforman la Megalópolis.

Así mismo, el reconocimiento de que puede existir transporte de contaminantes entre las cuencas atmosféricas vecinas a la ZMVM ha motivado a diferentes académicos y la SEMARNAT a realizar estudios sobre este fenómeno. El INECC en 2016 (UNAM & INECC, 2016) presentó un estudio de revisión de los esfuerzos académicos de modelación matemática sobre el movimiento de los vientos en el centro de México, de donde se propusieron los siguientes patrones de intercambio de masas de aire entre las cuencas atmosféricas de la Megalópolis:

- a) La ZMVM exporta partículas hacia el norte (Estado de México e Hidalgo) entre enero y marzo; hacia el estado de Morelos en mayo y julio a diciembre; hacia el este del Estado de México en el Valle de Toluca de septiembre a diciembre; y en mayo permanecen en el Valle de México y zonas aledañas;
- b) Cuernavaca-Cuautla exportan de enero a abril y en noviembre hacia la ZMVM a través de la Sierra del Chichinautzin y el Paso de Tenango del Aire, y de mayo a octubre hacia el Valle de Toluca a través del Paso de Tenango del Valle;
- c) Puebla-Tlaxcala exportan hacia el norte del estado de Puebla en enero-abril y noviembre-diciembre, mientras que lo hace hacia la frontera con Morelos en enero, hacia San Martín Texmelucan en enero-abril, en mayo hacia el suroeste, y hacia el Valle de México a través del Paso de Tenango del Aire en junio-septiembre;
- d) Pachuca exporta hacia el este del Estado de México, a través del corredor Texcoco-Amecameca y Ozumba, principalmente entre junio y diciembre.

Dentro de las ciudades que integran la Megalópolis del Centro de México son la ZMVT y la ZMVM las que por su tamaño, cercanía y desarrollo han sido más estudiadas, además de contar con redes de monitoreo atmosférico automáticas que permiten determinar el nivel de contaminación de manera continua.

En una revisión de los niveles de la concentración de partículas menores a 10 μ m (PM₁₀) y partículas menores a 2.5 μ m (PM_{2.5}) en las ciudades dentro de la Megalópolis que contaban

con estaciones de monitoreo de calidad del aire en 2015 y 2016 realizada por la SEMARNAT (2017), llegando a las siguientes conclusiones:

- En 2015 en la ZMVM y ZMVT se incumplieron los límites de concentración establecidos en la NOM de PM_{10} y $PM_{2.5}$ en todas las estaciones y lo hicieron con concentraciones máximas de entre 2.3 y 4.1 veces el límite de 24 horas (75 µg m⁻³) y entre 1.6 y 6.1 veces el límite anual (40 µg m⁻³) para PM_{10} , y de entre 2.4 y 4 veces el límite de 24 horas para $PM_{2.5}$ (45 µg m⁻³), así como 2.3 y 3.5 veces el límite anual (12 µg m⁻³).
- Para 2016 en las ZMVM y ZMVT también fueron incumplidas las normas para PM_{10} y $PM_{2.5}$, con concentraciones máximas de entre 2.6 y 2.8 veces el límite de 24 horas (75 µg m⁻³) en 1.6 y 1.8 veces el límite anual (40 µg m⁻³) para PM_{10} , y de entre 2.7 y 3 veces el límite de 24 horas (45 µg m⁻³), y de entre 2.5 y 3.5 veces el límite anual (12 µg m⁻³) para $PM_{2.5}$, respectivamente.

En este mismo estudio (SEMARNAT, 2017) además se evaluaron las tendencias de días en incumplimiento a la NOM para PM_{10} y $PM_{2.5}$ para la ZMVM y la ZMVT de 1995 a 2016 para PM_{10} y de 2003 a 2016 para $PM_{2.5}$, respectivamente. La Figura 1.2 muestra esta evaluación.



Figura 1.2. Porcentaje anual de días de incumplimiento a la NOM para PM_{10} (izquierda) y $PM_{2.5}$ (derecha) en 24 horas para la ZMVM y la ZMVT entre 1998 y 2016 para PM_{10} y para 2003 a 2016 para $PM_{2.5}$, cuando se tuvieron datos disponibles (Adaptado de SEMARNAT, 2017).

La Figura 1.2 muestra que, mientras que el incumplimiento para la NOM en PM_{10} parece manifestar una tendencia a la disminución en ambas zonas metropolitanas, no hay un cambio que pudiera ser considerado consistente en años continuos. Así, mientras que el porcentaje de días por arriba de la NOM para PM_{10} tanto en la ZMVM y la ZMVT entre 2006 y 2016 fue relativamente similar con un promedio de aproximadamente 50% de los días, para $PM_{2.5}$ en la ZMVM el porcentaje de días por arriba de la NOM fue de aproximadamente 15% mientras que en la ZMVT fue de cercano al 40% para ese mismo periodo. La combinación de la evaluación de los niveles máximos y los días por arriba de la respectiva norma para PM_{10} y $PM_{2.5}$ claramente indican que el problema es más serio en la ZMVT que en la ZMVM.

Por otro lado, hasta donde se tiene conocimiento, el único estudio que se ha realizado sobre la posibilidad de transporte de partículas entre la ZMVM y la ZMVT enfocado específicamente a estas regiones es el realizado por Chuquer-Sola (2014). En este trabajo, se investigó la posibilidad de transporte por el viento de PM₁₀ entre estas dos cuencas mediante un estudio de la topografía de la Sierra de las Cruces e identificando los posibles pasos de montaña a través de los cuales podrían ser intercambiadas parcelas de aire y se analizó con un modelo meteorológico (CALMET). Para esto, el autor realizó un análisis estadístico de los registros de promedios de 24 horas PM₁₀ en las estaciones que midieron este contaminante del año 2003 e hizo una selección de eventos en los que un análisis de correlación sugirió posible asociación entre estaciones de medición tanto en la ZMVT y la ZMVM, con este resultado identificó las temporadas del año en que esta asociación fue más favorable, así como las condiciones meteorológicas durante esos eventos y los pasos de montaña más propicios al intercambio de masas de aire. Posteriormente, procedió a aplicar un modelo de dispersión de PM_{10} (CALPUFF) estableciendo un centroide en cada una de las áreas metropolitanas como punto de emisión utilizando los inventarios de emisiones disponibles de este contaminante para fechas seleccionadas con la información meteorológica típica de los periodos previamente identificados y que se asume favorece el intercambio de masas de aire. Los resultados de la emisión son comparados con las mismas fechas para los que se tiene medición de PM_{10} y los eventos con mejor aproximación se tomaron como base para identificar que paso de montaña es más recurrente para el intercambio y que cuenca atmosférica domina en la exportación de contaminantes.

El estudio de Chuquer-Sola dio por resultado que, las condiciones propicias para el intercambio de contaminantes entre las dos cuencas se presentan entre abril y mayo cuando la precipitación pluvial es la mínima en el año, se registran altas temperaturas, la radiación solar es intensa y hay fuerte influencia de los vientos alisios, favoreciendo el cruce de los contaminantes a través de la Sierra de las Cruces, llevando a la ocurrencia de eventos de PM₁₀. La conjugación entre las trayectorias de retroceso y los eventos con mayor correlación entre mediciones en las dos cuencas dio por resultado la identificación de dos zonas que por sus características orográficas hicieron posible el intercambio de

contaminantes, situándose estas en torno a las poblaciones de Salazar y Santa Cruz de Ayotuxco ambas en el Estado de México.

Este estudio además encontró que el transporte de PM_{10} ocurre en ambas direcciones y de acuerdo con el análisis realizado, este fenómeno explicó entre el 6.4 y 23.7% del valor total de la concentración de PM_{10} observada ZMVM y entre 4.2 y 7.3% de la concentración observada de PM_{10} en la ZMVT para las fechas de eventos seleccionadas. En general, el "impacto" de la importación de PM_{10} a cada una de las cuencas afecta por una parte a todo el lado poniente y sur de la ZMVM, y al lado oriente de la ZMVT. En específico, las alcaldías Cuajimalpa, Álvaro Obregón, Magdalena Contreras, Miguel Hidalgo y Tlalpan de la CDMX son las potencialmente más afectadas, mientras que los municipios de Lerma, Metepec, San Mateo Atenco y Toluca en la ZMVT pueden recibir contribuciones de PM_{10} de la ZMVM.

Sin embargo, el estudio no clarifica a mayor detalle cómo se presenta esta dinámica de intercambio, aunado al hecho de que la correlación de promedios de 24 horas de PM_{10} para identificar posibles eventos de intercambio representa una suposición que podría tener problemas de incertidumbre considerando que las PM_{10} constan en dos fracciones: gruesa (PM_{10} - $PM_{2.5}$) y fina ($PM_{2.5}$), y que la primera de ellas tiene su origen en procesos naturales básicamente de resuspensión de polvos que rápidamente sedimentan sin lograr ser transportados a gran escala, mientras que las partículas en la fracción fina, sí pueden transportarse con el viento a grandes distancias sin sufrir pérdidas significativas durante este acarreo. Asimismo, la suposición de que el acoplamiento de los promedios de 24 horas con trayectorias de retroceso que inician a la hora en que se obtiene el promedio, también presenta incertidumbre dado que las concentraciones de las partículas siguen un patrón de ocurrencia diurno diferente dependiendo del sitio de muestreo, siendo variable el horario del máximo de su registro.

JUSTIFICACIÓN

En la ZMVM y ZMVT durante los años 2016 y 2017 se registraron apenas algunos días con calidad del aire considerada buena en cuestión de $PM_{2.5}$ (SEMARNAT, 2017).

Dado que ambas metrópolis forman parte de la Megalópolis del centro de México están sujetas a su programa PROAIRE de 2017-2030, que menciona como parte del análisis ecosistémico que la cantidad de emisiones generadas por las fuentes ubicadas en las ciudades que la conforman ha alcanzado niveles en que los fenómenos de transporte cobran mayor importancia, requiriendo una estrategia regional que los incluya explícitamente. A este respecto dentro de las medidas para lograr mejorar la calidad del aire que propone este documento, en la línea estratégica titulada "Mejora de las capacidades de gestión de la calidad del aire", se menciona en la medida 37, como una de las acciones: "Se realizan

estudios de campo sobre química atmosférica, depósito y transporte de contaminantes entre cuencas atmosféricas" (SEMARNAT, 2017).

Considerando lo anterior y con el fin de mejorar el conocimiento de la dinámica de la formación de contaminantes atmosféricos, su ocurrencia, transporte y remoción dentro de la Megalópolis del Centro de México, el Instituto de Ciencias de la Atmósfera y Cambio Climático entonces Centro de Ciencias de la Atmósfera de la Universidad Nacional Autónoma de México (CCA-UNAM) presentó una propuesta de investigación al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) denominada "Impacto de las emisiones móviles y fijas a la distribución de carbono negro y gases contaminantes en la vertical en zonas urbanas y periurbana del centro de México" (CCA-PT17), en donde uno de los objetivos particulares incluyó realizar un diagnóstico de la calidad del aire de la ZMVT en sitios representativos de máximo impacto a la calidad del aire por tráfico vehicular y transporte a mediana y larga escala de contaminantes del aire.

En este contexto, una de las propuestas de investigación para dicho proyecto fue enfocada a fortalecer el conocimiento sobre el posible impacto del transporte de contaminantes en la calidad del aire de la ZMVT y de la exportación de contaminantes generados en esta cuenca hacia cuencas vecinas como la de la ZMVM.

De esta forma, el propósito de la presente tesis fue investigar a detalle la posibilidad de intercambio de partículas en su fracción fina, entre la ZMVM y la ZMVT para uno de los pasos de montaña previamente identificados como factibles en la zona de Salazar-La Marquesa en el Estado de México, mediante la integración de datos horarios de partículas en las estaciones de monitoreo del área de influencia de este paso, y la identificación de las posibles trayectorias que estuvieron asociadas a la ocurrencia del valor máximo de concentración horaria en días identificados en las dos cuencas atmosféricas durante la campaña de medición de contaminantes en la ZMVT entre febrero y marzo de 2017.

HIPÓTESIS

Existe un intercambio intercuenca de $PM_{2.5}$ entre el Valle de México y el Valle de Toluca a través de un paso de montaña en la parte central de la Sierra de las Cruces que puede contribuir a la ocurrencia de eventos de contaminación en la cuenca receptora.

OBJETIVO GENERAL

Identificar y obtener los patrones de transporte de masas de aire durante los periodos de máxima concentración de PM_{2.5} en el periodo de la campaña de medición CCA-PT17 en las

cuencas del Valle de México y Valle de Toluca y evaluar la existencia de intercambio por el paso de montaña de la Sierra de las Cruces.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Obtener indicadores de cumplimiento normativo y comportamiento temporal de PM_{2.5} en los sitios de referencia para la identificación del intercambio inter-cuencas para el periodo del 15 de febrero al 14 de marzo en que se realizó CCA-PT17, con el fin de identificar episodios de concentración elevada.
- Identificar regiones de procedencia de las masas de aire que impactan las Zonas Metropolitanas del Valle de México y Valle de Toluca en periodos horarios de máxima concentración de PM_{2.5} a través de trayectorias de retroceso, durante el periodo de interés.
- Usar análisis de conglomerados como herramienta para identificar los patrones de desplazamiento de las masas de aire que arriban a los sitios de muestreo durante el periodo de realización de CCA-PT17.

CAPÍTULO 2 ANTECEDENTES

2.1 CONTAMINACIÓN POR PARTÍCULAS SUSPENDIDAS EN MÉXICO

Dentro de las cuestiones ambientales que en México han cobrado mayor auge están las relacionadas con la calidad del aire, ya que cada vez es más evidente que el problema no se limita a emisiones locales si no que puede llegar a agravarse cuando ciertas condiciones atmosféricas a escala regional favorecen el intercambio de masas de aire contaminado aún a pesar de las barreras orográficas que se supondría evitarían este intercambio.

En México la calidad del aire está regulada por Normas de Calidad del Aire para cada uno de los seis contaminantes criterio (Tabla 2.1), mismos que establecen valores umbrales por encima de los cuales se estima que es posible generar daños a la salud de la población. Sin embargo, estos valores son con frecuencia rebasados, especialmente en zonas de alta concentración poblacional y en determinadas épocas del año.

contaminantes criterio.					
Contaminante Criterio	Norma de calidad del aire	Valor límite	Periodo promediado		
Monóxido de Carbono (CO)	NOM-021-SSA1-1993	11 ppm	Móvil 8h		
Dióxido de Nitrógeno (NO2)	NOM-023-SSA1-1993	0.21 ppm	Horario		
Dióxido de Azufre (SO ₂)	NOM-022-SSA1-2010	0.2 ppm	Horario		
		0.025 ppm	Anual		
Ozono (O ₃)	NOM-020-SSA1-2014	0.095 ppm	horario		
		0.070 ppm	Móvil 8h		
Partículas Suspendidas	NOM-025-SSA1-2014	75 μg m ⁻³	24 horas		
Menores a 10 μm (PM ₁₀)		40 µg m ⁻³	Anual		
Partículas Suspendidas Menores a 2.5 μm (PM_{2.5})		45 μg m ⁻³	24 horas		
		12 μg m ⁻³	Anual		

Tabla 2.1. Normas Oficiales Mexicanas (NOM) y límites máximos permisibles de contaminantes criterio

El Sistema de Cuencas Nacionales de México determinó que en el año 2018 los costos por degradación ambiental atribuible a la contaminación atmosférica fueron más de 600 mil millones de pesos, lo cual equivale a 2.8% del Producto Interno Bruto Nacional (INEGI, 2019). De los contaminantes evaluados en los Informes Nacionales de los años 2016-2018 resultaron ser las partículas y el ozono los que mostraron mayor cantidad de sitios y días con valores por encima de lo normado (INECC, 2017, 2018, 2019). Los efectos adversos en la salud atribuidos a estos contaminantes van desde problemas para respirar y daño pulmonar para el ozono, hasta aumento de la mortalidad asociado a eventos cardiovasculares y respiratorios en el caso de PM_{10} y $PM_{2.5}$ (Kang et al., 2014).

Específicamente para el caso de partículas en los sitios donde han tenido mayor impacto en el periodo 2016-2018 resultaron ser Mexicali, Monterrey, el Valle de Toluca, el Valle de México, Atotonilco en Hidalgo, Guadalajara en Jalisco y Celaya en Guanajuato (INECC, 2017, 2018, 2019).

El origen de la contaminación por partículas (PM_{10} y $PM_{2.5}$) en el país, según refieren datos del Inventario Nacional de Emisiones de Contaminantes Criterio de 2016, es principalmente debido a fuentes de área, entre las que destacan las actividades agropecuarias y quema de combustibles, seguido de las fuentes fijas en las que se encuentra la industria y la generación de energía, y finalmente las fuentes móviles, siendo las fuentes vehiculares carreteras las de mayor aportación y que engloban tractocamiones, autobuses, camiones, automóviles y motocicletas (SEMARNAT, 2019). Cabe señalar que este inventario considera únicamente las PM_{2.5} y PM₁₀ emitidas de manera primaria por las fuentes mencionadas, y aunque contabiliza la presencia de COV's, NH₃, SO₂ y NOx que son precursores de partículas secundarias no se hace referencia a la proporción que estas podrían tener en la contaminación por partículas. Estudios como los de Vega et al. (2010) y Mugica y colaboradores (2009) donde usando caracterización química y modelo de balance de masa (CMB) se encontró que en promedio en la Ciudad de México los aerosoles secundarios aportan a las PM_{2.5} entre un 14% y un 11%, por su parte en la Zona Metropolitana de Monterrey (AMM) se observó que este aporte puede llegar hasta el 31% en el verano (Martínez-Cinco et al., 2016), haciendo que la presencia de partículas secundarias represente una contribución significativa en la contaminación debida a partículas en estos sitios.

Aunque la concentración de partículas está en gran medida relacionado con la dinámica de las fuentes en el sitio, se ha identificado un comportamiento estacional de las concentraciones, el cual está caracterizado por el aumento de valores en el periodo de invierno cuando se presenta la entrada de masas de aire polar que generan decremento en la temperatura y se asocian con un incremento en los episodios de inversión térmica y en consecuencia de estabilidad atmosférica y acumulación de contaminantes, mientras que durante el verano con la llegada de las lluvias se favorece la remoción por vía húmeda de estos contaminantes.

2.2 DESCRIPCIÓN DE LAS ZONAS DE ESTUDIO

2.2.1 Zona Metropolitana del Valle De México (ZMVM)

La ZMVM se asienta sobre una cuenca atmosférica semiabierta a 2240 msnm con una superficie de cerca de 774 km². Por sus características geográficas, el clima dentro del Valle de México es variado, y aunque recibe una alta insolación durante todo el año las condiciones de altitud y relieve modifican las circunstancias, proporcionando un clima templado semiseco en el noreste, templado subhúmedo en el centro y semifrío subhúmedo en altitudes mayores a 2800 metros. La temperatura media anual varía entre 15 y 17 °C (Secretaría del Medio Ambiente, 2005).

Tomando en cuenta las condiciones de temperatura y precipitación, se consideran 3 temporadas del año en la Ciudad de México.

- Secas frías: para los meses de noviembre- febrero, cuando las masas de aire polar traen tiempo anticiclón, caracterizado por cielos despejados y vientos débiles (condiciones de calma). Con vientos dominantes por arriba de los 1000 m de altura con origen SE y cuando se presentan vientos polares del N y NE
- Secas calientes: en los meses de marzo mayo, cuando los vientos tropicales comienzan a dominar, sin embargo, no contienen la suficiente humedad para generar lluvia, lo cual produce cielos claros y estabilidad atmosférica, con vientos dominantes del NE
- Lluvias: en el periodo de junio -octubre, cuando los vientos tropicales acarrean aire inestable y condiciones de humedad se producen intensas lluvias con vientos dominantes del NE (GEM, 2007a; Jaimes-Palomera et al., 2016)

Se ha identificado que el patrón de viento a nivel de superficie en el Valle de México presenta como entrada principal la zona norte debido a que el terreno es más plano (Figura 2.1). Dependiendo de la época del año, la influencia de sistemas meteorológicos hace que exista una segunda entrada de viento por la región noreste del valle; incluso, puede darse que el flujo del viento sea de sur a norte, cuando el viento en capas medias de la tropósfera es suficientemente intenso como para que, a pesar de la barrera montañosa, se imponga esa dirección, sobre todo en los meses invernales. Es necesario remarcar que las dos últimas direcciones descritas normalmente se presentan en un porcentaje bajo, de tal forma que estos comportamientos no siempre se detectan (Secretaría del Medio Ambiente, 2008).

La población estimada en la Zona Metropolitana del Valle de México en el año 2010 fue de más de 20 millones de habitantes (Secretaría del Medio Ambiente de la Ciudad de México, 2018), esta población no se distribuye de manera uniforme pues menos de la mitad de sus

habitantes reside dentro de la Ciudad de México, si bien el crecimiento urbano se ha desacelerado, durante la última década la población en las zonas periféricas creció más rápido que la del núcleo urbano, conllevando a la expansión de la mancha urbana. La densidad de población del Valle de México fue de 13,500 habitantes por km² en 2015 (OCDE, 2015).

Las actividades económicas preponderantes en la ZMVM corresponden al sector terciario, especialmente servicios financieros, comunicaciones y transportes y bienes raíces, seguido de actividades de transformación, mismas que se han descentralizado de manera que las industrias manufactureras se ubican en el norte de la CDMX, en su conurbación o bien se han desplazado a otros núcleos industriales como Toluca.



Figura 2.1. Delimitación geográfica de la ZMVM mostrando rosas de viento para cuatro sitios representativos del área urbana. El color púrpura demarca la zona urbana. (Adaptado de Garzón et al., 2015).

2.2.2 Zona Metropolitana del Valle De Toluca (ZMVT)

La ZMVT está rodeada de aparatos volcánicos individuales (Figura 2.2); así mismo se encuentran en forma aislada algunas elevaciones que son de especial importancia pues resultan ser elementos decisivos en la dirección del viento, como el volcán Nevado de Toluca, el cerro La Calera y volcán Gordo que son determinantes para el viento que sopla del sur, por su parte los cerros La Palma, La Campana y el Gavilán pertenecientes a la Sierra de las Cruces constituyen una obstrucción considerable para los vientos alisios que arriban al valle. La dominancia de los vientos durante el invierno es de sur a norte con una ligera curvatura en sentido horario, mientras que en verano el movimiento es de sur a noroeste con una curvatura más pronunciada pero también en sentido de las manecillas del reloj (GEM, 2018).



Figura 2.2. Delimitación geográfica de la ZMVT mostrando la rosa de vientos para el centroide del área urbana que está mostrada en color gris obscuro. (Adaptado con datos del INEGI de GEM-SMA, 2012).

Los tipos de climas predominantes son, templado húmedo en la mayoría de los municipios, semifrío subhúmedo en las sierras que rodean al valle, semifrío húmedo en una porción de Xalatlaco, y clima frío en zonas altas del Nevado de Toluca a nivel de superficie predominan vientos del sureste.

Las temporadas climatológicas identificadas son similares a las de la ZMVM:

• Temporada seca-fría: en los meses de noviembre a febrero con un rango de temperatura entre 9 y 11°C, con heladas por bajas temperaturas y nevadas ocasionales. Desplazamiento de frentes fríos y masas de aire polar como sistemas meteorológicos predominantes, cuya intensidad determina cuanto es afectada la

ZMVT por sistemas anticiclónicos (tiempo atmosférico estable y seco) pudiendo generar inversiones térmicas. Los vientos dominantes son SO, con vientos polares N y NE.

- Temporada seca-cálida: en los meses de marzo a mayo se presenta un ascenso de temperatura hasta los 15°C, durante ambas épocas secas la precipitación pluvial es poco significativa con registros inferiores a los 40 mm.
- Temporada de lluvia: entre los meses de junio a octubre hay presencia de precipitaciones en un rango de entre 160 y 210 mm, con una temperatura de 11 a 13°C. Con influencia de sistemas meteorológicos tropicales, además de las constantes ondas y ciclones tropicales que aportan la humedad más importante del año en forma de nublados y lluvias abundantes sobre la zona.

La ZMVT es una de las conurbaciones más importantes del Estado de México y del país en general, alberga a más de 2 millones de habitantes, está integrada por 16 municipios con una superficie de 2669.6 km² (GEM, 2018). La población dentro de la zona metropolitana se encuentra heterogéneamente distribuida pues mientras Toluca casi alcanza el millón de habitantes, Metepec, Zinacantepec, Almoloya de Juárez y Lerma cuentan con más de 100 mil habitantes y el resto de los municipios no logra tal población, a su vez San Mateo Atenco, Metepec y Toluca constituyen los municipios más densamente poblados de la entidad (Consejo Estatal de Población, 2021).

En cuanto al desarrollo económico de la zona está dado en su mayoría por el sector terciario y secundario, con industrias de diversos tamaños establecidas ampliamente en Toluca, San Mateo Atenco, Metepec y Lerma, municipios como Zinacantepec y Almoloya de Juárez cuentan con un desarrollo importante del sector de servicios (Secretaria del Medio Ambiente, 2012).

2.2.3 Orografía intercuenca

Como lo muestra las Figuras 2.1 y 2.2, tanto la ZMVM como la ZMVT presentan una orografía irregular y están rodeadas de montañas de elevación importante, razón por la cual bajo ciertas condiciones meteorológicas se ve limitada la ventilación de los contaminantes. Chuquer-Sola (2014) realizó un análisis detallado del papel de la topografía entre las dos cuencas y encontró lo siguiente. La cuenca de la ZMVT está parcialmente rodeada por elevaciones que van de entre los 2800 msnm y los 4600 msnm:

- Al sur la Sierra del Xinantecatl y Sierra Matlazinca.
- Al norte los cerros Alto, La Guadalupana, La Venta y El Águila.
- Al oriente las Sierras de las Cruces y Monte Alto.
- Al poniente el Nevado de Toluca y lomeríos del municipio de Villa Victoria

En tanto que, del lado de la ZMVM, la cuenca esta alterada por elevaciones como:

- Al norte la Sierra de Guadalupe y el Cerro del Chiquihuite.
- Al centro el Cerro de la Estrella.
- Al oriente el Cerro de San Nicolás y la sierra volcánica de Santa Catarina.
- Al poniente y la Sierra de las Cruces y Monte Alto.
- Al sur y suroeste la Sierra del Ajusco (o Sierra del Chichinautzin).

Ambas cuencas comparten la Sierra de las Cruces, siendo ésta la principal barrera que separa la ZMVT y la ZMVM. Tiene una longitud aproximada de 110 km y un ancho que varía de entre 47 y 27 km siguiendo el sentido norte a sur, dependiendo de la cota de referencia. De acuerdo con la recopilación de Chuquer-Sola (2014) y García-Palomo et al. (2008), esta sierra está conformada por ocho estratovolcanes elevados traslapados que en dirección norte a sur son:

- La Bufa (3460 msnm)
- La Catedral (3780 msnm)
- Iturbide (3620 msnm)
- Chimalpa (3420 msnm)
- La Campana (3400 msnm)
- San Miguel (3870 msnm)
- La Corona (3770 msnm)
- Zempoala (3690 msnm)

La Figura 2.3 muestra la localización de estas elevaciones y la ubicación de las estaciones de monitoreo de interés para este estudio.

Cómo parte del documento de Cuencas Atmosféricas del Estado de México se describió a la región de la Sierra de las Cruces junto con la Sierra de Monte Alto como una cuenca atmosférica cuyas alturas oscilan entre los 2500 y 3700 msnm con flujos de viento dominantes en el flanco oriental (Valle de México) en dirección oeste durante la época fría y dirección este en la época cálida, mientras que en el flanco vecino a Toluca se presenta mayor cantidad de vientos con procedencia del este durante la época fría y del oeste durante la época seca (GEM, 2007a).

Chuquer-Sola (2014) concluyó que los pasos más importantes para el intercambio de contaminantes entre la ZMVM y la ZMVT se ubican entre los cerros La Catedral y Chimalpa al norte de la Sierra, y entre los cerros San Miguel y La Campana, siguiendo en ambos casos los tramos carreteros Naucalpan-Toluca, y México-Toluca, respectivamente.



Figura 2.3. Localización de la Sierra de las Cruces, los cerros que la integran y de las tres estaciones de monitoreo empleadas en este estudio SM-San Mateo Atenco, ININ-Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares y SFE-Santa Fe. (Elaboración propia sobre mapa tomado de Google Maps).

2.2.4 Contaminación por PM2.5 en la ZMVM y ZMVT

Los Valles de México y Toluca cuentan con sistemas de monitoreo de la calidad del aire (SMCA) que difieren en tamaño y en nivel de desarrollo. En Toluca consta de 7 estaciones de monitoreo automático, distribuidas en los municipios de Toluca, Metepec y San Mateo Atenco, a su vez la red correspondiente a la Ciudad de México y su conurbación abarca 43 estaciones que cuentan con mediciones automáticas, manuales o una combinación de ambas.

Gracias a los SMCA se puede saber que, en el año 2017 la ZMVM presentó cerca del 20% de días al año por encima de la norma de calidad del aire de 24 h para PM_{2.5}, también que la ZMVT casi alcanza el 50% de días del año bajo esta condición. Sin embargo, las mediciones representan a masas de aire con ya un grado de mezclado, donde los sectores económicos y las emisiones de poblaciones ubicadas viento abajo contribuyen a los niveles observados.

En el inventario de emisiones de contaminantes criterio del Estado de México realizado para el año 2016 se encontró que, del total del inventario, las fuentes puntuales dominan en

las emisiones de SO₂ (36.5%), las móviles en las de CO (76.5%) y NOx (51%) y las fuentes de área en las partículas PM₁₀ y PM_{2.5} (más del 80%), COV (47%) y el NH₃ (97%). Se resalta que las fuentes de área son las mayores aportadoras de partículas, lo cual no difiere de la ZMVT donde las fuentes de área son las principales responsables de las emisiones de PM₁₀ y PM_{2.5}, recibiendo su mayor aportación por actividades agropecuarias como quemas agrícolas y actividades de labranza (45% del total de fuentes de área), seguido de la combustión doméstica (30%). En segundo lugar de emisiones de PM_{2.5} se tienen las fuentes móviles con un 10% del total del inventario, siendo los autos particulares junto con la maquinaria agrícola y los vehículos pesados (tractocamiones y vehículos de más de 3.8 ton) los que representan más del 70% de las emisiones de PM_{2.5} en este rubro (SEMARNAT, 2019).

En la Ciudad de México la emisión de PM_{2.5} primaria está dominada por el sector transporte, que constituye el 56% del total del inventario, en el que nuevamente se observa la gran influencia de tractocamiones y autobuses. A nivel de la ZMVM, las fuentes de área son, como en la ZMVT, las principales fuentes de PM_{2.5}, en este caso los desechos urbanos (quemas a cielo abierto, tratamiento biológico de residuos y aguas residuales, rellenos sanitarios), las operaciones de construcción y la combustión son las actividades que más contribuyen a esta categoría, las fuentes móviles son las siguientes en importancia donde tractocamiones y autobuses por si mismos aportan poco más del 50% de lo inventariado en este rubro (SEDEMA, 2018b). Es importante señalar que la aportación de PM_{2.5} de origen secundario puede constituir una fracción importante de las PM_{2.5} presentes en la atmósfera, cómo lo detalla el Informe 2017 de Calidad del aire de Ciudad de México se identificó que el 30% de la masa de PM_{2.5} estudiada en el periodo de secas frías es de carácter secundario (SEDEMA, 2018a).

Si bien, los inventarios de emisión en conjunto con las mediciones generadas por los SMCA permiten determinar la severidad de la condición de contaminación en la que se encuentran ambas regiones, es necesario considerar que el diseño y aplicación de medidas de control efectivas orientadas tanto a PM_{2.5} como a otros contaminantes deben contemplar el hecho de que las concentraciones medidas son una combinación de emisiones locales y transportadas desde otros sitios, además de aerosoles formados de reacciones secundarias, por lo que es de especial importancia conocer las regiones en donde se originan las masas de aire y donde impactan dentro de la cuenca atmosférica receptora, así como los patrones que estas contribuciones presentan.

2.3 INTERCAMBIO DE EMISIONES CONTAMINANTES ENTRE CUENCAS ATMOSFÉRICAS DE LA MEGALÓPOLIS DEL CENTRO DE MÉXICO

Estudios de modelación matemática de trayectorias que siguen las masas de aire en la región que abarca la Megalópolis han identificado una aparente interacción entre las diversas cuencas atmosféricas del centro de México, así como los patrones de viento y transporte de masas de aire.

Magaña y Caetano (2007) definen como cuenca atmosférica en términos de calidad del aire a: "un espacio geográfico delimitado por elevaciones montañosas u otros atributos naturales con características meteorológicas y climáticas afines donde la calidad del aire a nivel estacional está influenciada por las fuentes de emisión antropogénicas y naturales al interior de esta y por concentraciones de fondo que llegan a la cuenca".



Figura 2.4 Mapas de densidad de trayectorias de parcelas de aire de 24 horas hacia delante (forward) con origen en: (a) Toluca y, (b) Ciudad de México, pueden apreciarse los sitios potencialmente impactados por las parcelas de aire que se originan en estas ciudades de acuerdo con Magaña y Caetano (2007) con los tonos de azul más intensos.

En este aspecto, el uso de trayectorias de parcelas de aire para conocer la ruta que estas pudieron haber seguido antes de su arribo y después de su paso por un punto en particular es útil para identificar los patrones de transporte de los contaminantes. Además, la tendencia a agruparse en determinadas regiones cercanas a la fuente emisora ayuda a identificar la zona potencial de las emisiones. De esta forma, la densidad de trayectorias que atraviesan una o varias fronteras previamente definidas permite identificar la ruta del flujo de parcelas de aire con potencial de arribo o paso por una región de interés en particular. La Figura 2.4 muestra el resultado del análisis de Caetano y Magaña (2007) de la densidad de trayectorias hacia adelante (que partieron de un punto en particular y se

desplazaron cierto periodo de tiempo en el tiempo) de 24 horas de duración desde un punto hipotético en el centro de la CDMX y de Toluca para varias temporadas del año, la densidad de trayectorias implica que hay ciertas regiones donde es más probable que una trayectoria atraviese y por consecuencia presente afectaciones o donde el depósito puede ser sustancial. Esta figura muestra que, si bien hay cierto patrón distintivo en la forma en que se distribuyen las densidades de las trayectorias, existe interacción entre diferentes cuencas atmosféricas.

Se ha señalado que la cuenca atmosférica del Valle de México donde se asienta la Ciudad de México y su zona metropolitana, además de estar bajo la influencia de emisiones locales, puede estar influenciada por las emisiones del complejo industrial de Tula ubicado al norte, así como del volcán Popocatépetl al sureste con contribuciones de partículas y bióxido de azufre (SO₂) (Jiménez et al., 2004; De Foy et al., 2009; García-Escalante et al., 2014).

Por otro lado, la exportación de contaminantes de la Zona Metropolitana del Valle de México a otras cuencas atmosféricas ha sido un tema de investigación relativamente recurrente por diferentes organismos. Durante la campaña MILAGRO de 2006, se investigó el papel de esta zona urbana como generador y exportador potencial de contaminantes del aire hacia el noreste de la cuenca del Valle de México con alcance hasta la frontera sursureste de los Estados Unidos (Molina et al., 2010). En esta campaña se confirmó que, bajo ciertas condiciones meteorológicas, la pluma de contaminación de la ZMVM puede acarrear contaminantes, tanto gaseosos como partículas hacia el noroeste del Golfo de México. Si bien, las concentraciones llegan a ser bajas por la dilución, diversos trazadores medidos confirman este alcance. Otro estudio de menor escala espacial (García-Yee et al., 2018), confirma el transporte de masas de aire ricas en precursores de ozono entre el oriente de la ZMVM y Cuautla a través del paso rural Amecameca-Tenango durante la mañana, para después del medio día retornar a la ZMVM con altos niveles de ozono. García-Reynoso et al. (2009) analizaron a detalle las características de un evento de ozono ocurrido en la ZMVM en un día inhábil y encontraron que era posible que el ozono formado en el Valle de Toluca hubiese ingresado a la Cuenca del Valle de México por el noreste incrementando los niveles locales de este contaminante. En otro estudio de modelación y análisis de datos de monitoreo de NOx en la ZMVM y Cuernavaca se concluye que es posible el intercambio de contaminantes entre estas dos zonas urbanas a través del paso: Parres-Tres Marías al sur de la Ciudad de México. Esta ruta fue también encontrada por Cuevas-Contreras (2014) en un estudio para definir el origen de parcelas de aire con niveles importantes de HNO₃ gaseoso con llegada al suroeste de la CDMX. En una investigación reciente, Chuquer-Sola (2014) encontró que es factible el intercambio de masas de aire ricas en PM₁₀ entre los valles de México y Toluca a través de dos pasos de montaña de altitud relativamente baja en la Sierra de las Cruces al poniente del Valle de México.

Otros estudios han investigado el intercambio entre cuencas diferentes a la del Valle de México. Salcedo et al. (2012) realizaron un diagnóstico de la calidad del aire en el Valle de

Cuernavaca-Cuautla y observaron que los vientos estaban dominados por la influencia diurna con corrientes de aire del valle y de montaña, con una componente vespertina hacia el noreste de esta cuenca con niveles importantes de ozono con posible transporte de masas de aire a Puebla. Barrera Huertas et al. (2019) presentaron los resultados de una investigación para determinar la dinámica del transporte de contaminantes en el Valle Puebla-Tlaxcala, determinando que los vientos cambian de dirección a lo largo del día: siendo hacia el sureste y sur durante la noche y las primeras horas del día y hacia el noreste durante la tarde y primeras horas de la noche, confirmando el transporte de masas de aire ricas en ozono provenientes de Cuautla y Cuernavaca.

En general, la mayor parte de estos estudios han estado basados en un conjunto de resultados de modelación de trayectorias de las masas de aire que ya sea siguieron las parcelas de aire para llegar a un sitio de interés (backward) o bien las concentraciones de un contaminante trazador del posible origen. Sin embargo, casi todos estos estudios se han apoyado en datos de contaminantes gaseosos y son contados los que han involucrado mediciones o modelación de partículas, en particular de la fracción fina de estas (PM_{2.5}).

2.4 ORIGEN Y FORMACIÓN DE LAS PARTÍCULAS ATMOSFÉRICAS

Las partículas atmosféricas tienen un origen primario por emisión directa de una fuente o un origen secundario, a través de la formación *in situ* de la fase gaseosa de las emisiones (nucleación) y en la atmósfera por reacciones químicas entre gases. Las partículas varían en tamaño desde unos pocos nanómetros hasta decenas de micrómetros, reflejando su fuente de emisión en su composición (Seinfeld & Pandis, 1998).

Tras su emisión a (o formación en) la atmósfera, las partículas se mueven bajo la influencia de corrientes locales de aire al mismo tiempo que se difunden, posiblemente colisionando entre ellas a través de procesos turbulentos y Brownianos, estos procesos además de diluir las partículas, las mezclan con compuestos gaseosos y otras partículas. Las colisiones entre dos o más partículas, donde estas se adhieren para formar partículas más grandes (proceso de coagulación), aumenta efectivamente la masa de las partículas disminuyendo en consecuencia la cantidad de partículas más pequeñas, y frecuentemente es un mecanismo importante para cambiar el espectro del tamaño de los aerosoles hacia partículas más grandes (Pandis, 2004).

Si las partículas no sufren coagulación, que es un proceso relativamente rápido cerca de la fuente de emisión, ellas pueden viajar lejos de la zona de emisión interactuando con vapores y gases como H_2SO_4 , compuestos orgánicos, HNO_3 , y NH_3 . Estos vapores semivolátiles o reactivos condensan sobre las superficies disponibles. Algunos vapores ya condensados en la superficie reaccionan con otros y los atraen hacia ellos integrándolos a la fase condensada. También se forman partículas como resultado de reacciones en fase

gaseosa transfiriendo de esta forma material gaseoso a la fase particulada. Por esa razón, debido a que los componentes semivolátiles se intercambian continuamente entre las fases gaseosa y condensada, es difícil medir con precisión las concentraciones de partículas en la atmósfera y determinar completamente el comportamiento de los aerosoles y su impacto.

Durante el tiempo de vida de las partículas, su composición individual cambia continuamente, cerca de la fuente de emisión, la composición de las partículas primarias es determinada por los procesos químicos y físicos que ocurren dentro de la fuente. Sin embargo, el procesamiento atmosférico lleva a la adición y coagulación de especies secundarias sobre las partículas preexistentes. Si estas se encuentran en ambientes húmedos que exceden una humedad relativa del 70% y dependiendo de su composición, pueden absorber vapor de agua y como resultado formar soluciones acuosas concentradas. La cantidad de agua condensada por este proceso puede ser alta, con incrementos en la partícula-masa en factores de tres o cuatro entre porcentajes de baja (<40%) y alta (> 80%) humedad relativa. Conforme la humedad relativa decrece, el agua se re-volatiliza, resultando un secado de las partículas.

Típicamente, las partículas son transportadas grandes distancias por el viento conforme van ocurriendo los procesos fisicoquímicos antes descritos. A una rapidez de viento de unos pocos metros por segundo, las partículas pueden viajar algunos cientos de kilómetros horizontalmente, y varios kilómetros verticalmente, en el periodo de un día.

Las partículas atmosféricas son eventualmente removidas por depósito húmedo en forma de lluvia, nieve, o neblina, o por depósito seco sobre la superficie de la Tierra. El tiempo de residencia o permanencia de las partículas en la atmósfera se encuentra en función principal del tiempo que pueden permanecer en la atmósfera sin ser removidas por depósito húmedo, lo cual varía con respecto a su tamaño y composición química principalmente, en este sentido las partículas más grandes o gruesas tendrán un tiempo de residencia menor que el de las partículas finas, ya que las primeras son removidas más efectivamente por depósito seco. Las partículas >20 µm pueden permanecer en la atmósfera por algunas horas, mientras que aquellas entre 2 y 3 µm pueden durar en ella de 2 a 4 días, así mismo las partículas carbonáceas y orgánicas son más difíciles de mojar por lo que antes de ser removidas por vía húmeda deben pasar un periodo de oxidación inicial lo que prolonga su estancia en la atmósfera. Son estos tiempos de residencia los que determinan el alcance del transporte de estos contaminantes, los aerosoles inorgánicos secundarios viajan cerca de 3000 a 4000 km, las partículas primarias finas cerca de 2000 a 3000 km y las partículas primarias gruesas alrededor de 500 a 100km dependiendo de las condiciones atmosféricas predominantes (INE-SEMARNAT, 2006; WHO, 2006).

2.4.1 Distribución de tamaños y modas de acumulación de partículas

Como resultado de la emisión de la partícula, la formación in situ en la atmósfera y los procesos fisicoquímicos subsecuentes, la distribución de tamaños y concentración está caracterizada estadísticamente por varias "modas" (el valor con mayor frecuencia en una distribución de datos). La Figura 2.5 muestra una representación generalizada de tres tipos de distribuciones utilizadas frecuentemente y las modas que se presentan en cada una de ellas para entender el comportamiento de las partículas, incluyendo los mecanismos de formación, origen y dominancia en la atmósfera. El esquema incluye ilustraciones de los posibles mecanismos de su formación, acumulación, interacción y remoción, y de se identifican y distribuyen las diferentes modas respecto a los términos PM₁₀ y PM_{2.5}.



Figura 2.5 Esquema idealizado de la distribución normalizada de partículas en la atmósfera en forma de modas de frecuencia de acuerdo con su tamaño y a otros parámetros utilizados para su cuantificación (número, N; masa, M; volumen, V; área de superficie, S) (Adaptado de: Buseck y Adachi, 2008).

La representación de la distribución normalizada del número de partículas con respecto al rango de tamaño en que fueron medidos (dN/d ln d_p) permite distinguir con claridad varias sub-modas en la tendencia: nucleación, Aitken, acumulación y gruesa, donde la magnitud

de la distribución normalizada disminuye conforme aumenta el tamaño de la partícula. Sin embargo, si la distribución se encuentra en función del área superficial de las partículas (dS/d ln d_p), se observa una sola moda en la tendencia, pero cuando se caracteriza esta distribución en función a la masa o volumen (dM/d ln dp ó dV/d ln dp) se aprecian claramente dos modas: una de acumulación que va de aproximadamente 0.1 a 2.0 μ m (partículas finas), y otra que representa la moda gruesa que va de aproximadamente 2 a 50 μ m (partículas gruesas).

Como se muestra en la Figura 2.5, las partículas con diámetros mayores a 2.5 μ m son identificadas operacionalmente como partículas gruesas, mientras que las de tamaño menor a 2.5 μ m son llamadas partículas finas, ésta última categoría típicamente incluye tanto mayoría del número de las partículas cómo una gran fracción de la masa (Adachi, 2008). Debido a que la fracción fina (PM_{2.5}) incluye básicamente partículas de origen antropogénico y a que pueden ingresar a las partes más profundas del sistema respiratorio, se ha dado mucha importancia a esta fracción contra las PM₁₀ en estudios de efectos sobre la salud.

Las partículas menores a 0.1 μ m se les denomina partículas ultrafinas y dominan cuando se considera su concentración en número, pero su concentración en masa puede ser despreciable. La moda de "nucleación" está constituida generalmente por partículas formadas *in-situ* por procesos precisamente de nucleación. Las partículas en esta moda tienen masa insignificante, por ejemplo, 100 mil partículas por centímetro cúbico con diámetro equivalente a 0.01 μ m tienen una concentración en masa de menos de 0.05 μ g cm⁻³. De esta forma, es posible tener un número muy grande de partículas ultrafinas con una contribución a la masa total despreciable. La moda de nucleación puede no estar presente en un aerosol en particular, dependiendo de las condiciones atmosféricas.

Muchos de los núcleos denominados Aitken inician su vida como partículas primarias, sobre ellas condensa material secundario conforme son transportados en la atmósfera, presentan un tiempo de permanencia en la atmósfera mayor a las partículas de la moda de nucleación.

La moda de acumulación de las partículas incluye emisiones primarias y aerosoles resultantes de la condensación de sulfatos, nitratos y orgánicos de la fase gaseosa, así como la coagulación de partículas muy pequeñas, generalmente las partículas que se encuentran en este rango de tamaños (0.1-1 μ m) permanecen más tiempo en la atmósfera ya que los mecanismos de remoción presentan menor eficacia para este rango de tamaños.

Finalmente, las partículas en la moda gruesa son generalmente de origen natural producidas por procesos mecánicos, por la acción del viento o erosión (polvo, sal marina, pólenes, etc.), son de origen primario e incluyen algunas contribuciones de aerosoles secundarios de sulfatos ($SO_4^=$) y nitratos (NO_3^-) (INE-SEMARNAT, 2006).

2.5 ANÁLISIS DE TRAYECTORIAS DE RETROCESO

Los modelos de dispersión de contaminantes atmosféricos son ampliamente usados para estudiar el transporte y difusión de contaminantes en el aire, hay dos métodos generales: el Lagrangiano y el Euleriano, el primero es ideal para fuentes puntuales, sin embargo no resulta conveniente para explicar procesos químicos complejos o fuentes múltiples (suele emplearse en modelos de tipo trayectoria), mientras que el segundo es especialmente útil para múltiples fuentes pues se resuelve sobre un dominio completo además que maneja química atmosférica compleja (se emplea en modelos de dispersión) (Fleming et al., 2012; Sun et al., 2017).

El uso de metodologías del tipo euleriano para estudiar el transporte de contaminantes se ha privilegiado en numerosos estudios donde se modela la química atmosférica y la difusión de los contaminantes en una malla determinada, algunos de estos estudios como el realizado por Boian et al. (2012), donde empleando un modelo Euleriano en 3-D lograron identificar el impacto del transporte de ozono y sus precursores entre las regiones metropolitanas de Campinas y Sao Paulo en Brasil. Por su parte Bartnicki (1994), empleando el modelo denominado HMET (Heavy Metals Eulerian Transport) que considera emisión, transporte atmosférico y depósito, logró simular la distribución de metales pesados como el Cadmio, Plomo, Zinc y Arsénico a través de Europa, encontrando que el uso de este modelo presentaba un buen ajuste a los resultados observados y que además podía emplearse para estimar el transporte transfronterizo de metales pesados en Europa. Un ejemplo más reciente se presenta en el trabajo de Hamer y colaboradores (2020) donde haciendo uso del modelo Euleriano en 3-D EPISODE, desarrollado para Noruega y considerando los procesos atmosféricos de difusión, advección y fotoquímica del NO_2 , se propusieron simular las concentraciones representativas en los puntos de la malla así como posibles receptores del NO_2 en 6 ciudades noruegas para el año 2015, mostrando un desempeño adecuado al compararse con mediciones in situ.

Si bien, con las metodologías eulerianas como las mencionadas en los trabajos de Hamer, Boian y Bartnicki, se ha estudiado el transporte de largo alcance de los contaminantes atmosféricos objetivo de cada estudio, cabe señalar que la representación de modelos eulerianos requiere datos meteorológicos, de emisiones en fuentes de área y línea, concentraciones de fondo, entre otros, según el modelo que se use. La información requerida debe estar disponible dentro de la malla y esto no siempre es posible, por lo tanto, el uso de solo un modelo euleriano podría no ser el adecuado, pues los objetivos del presente trabajo pretenden identificar los puntos de la Sierra de la Cruces donde se facilita el intercambio de masas de aire cargadas de PM_{2.5} así como el comportamiento de estas dentro de las cuencas atmosféricas de interés, lo cual es posible lograr con el uso de modelos de trayectorias de retroceso.
El uso de trayectorias hacia atrás (o retro-trayectorias) hace posible examinar las relaciones fuente-receptor y las escalas de tiempo del transporte local y de largo alcance. Aunque su uso no está exento de errores, principalmente originados por: suposiciones y errores en el campo de viento usado para su cálculo, incertidumbre derivada de la interpolación de datos meteorológicos dispersos, suposiciones con respecto al transporte vertical, errores de observación, fenómenos de subescala, turbulencia, convección, evaporación y condensación, además, la incertidumbre de las trayectorias se incrementa con el tiempo de duración de las mismas, ya sea de avance o retroceso. Sin embargo, tomando en cuenta las incertidumbres, las trayectorias hacia atrás con frecuencia se ajustan mejor a estudios sobre circulación de largo alcance (Stohl, 1998).

Una trayectoria se encuentra definida como: el recorrido de una partícula de aire de tamaño infinitesimal que pasa a través de la línea central de una masa de aire que se encuentra en advección sujeta a dispersión horizontal y vertical; mientras que el cálculo de trayectoria es un estimado de la ruta de transporte de la parte infinitesimal de una parcela de aire (Kulshrestha & Kumar, 2014). Así mientras las trayectorias de avance (forward) describe hacia dónde irán las partículas, las trayectorias de retroceso (backward) indican de dónde vienen.

Los modelos para la generación de trayectorias más ampliamente usados son: los modelos FLEXTRA, HYSPLIT, UGAMP, ECMWF, estos están con frecuencia acoplados a conjuntos de datos de modelos meteorológicos, por ejemplo, ATAD, MM5, GDAS, EDAS y WRF entre otros (Fleming et al., 2012; Poissant, 1999).

Las retro-trayectorias han sido usadas con frecuencia en combinación con mediciones de la calidad del aire, inicialmente en asociación con eventos individuales de contaminación, ejemplo de ello son los estudios de Burley et al. (2015), Ma et al. (2014) y Yang et al. (2017) sobre el transporte de ozono y de partículas durante eventos de alta concentración en diferentes partes del mundo. Existen otros trabajos referentes al transporte de partículas como los que refieren Fleming (2012) y Pérez et al. (2015) en sus artículos de revisión. En la mayoría de los casos mencionados las trayectorias fueron usadas para identificar el origen puntual de la masa de aire que impactó el sitio de interés.

Más recientemente se han empleado grupos de trayectorias esperando que la incertidumbre que presentan de manera individual sea compensada en el conjunto (Abdalmogith & Harrison, 2005). Estas colecciones de trayectorias y su asociación a concentraciones de algún contaminante a nivel del suelo pueden analizarse a través de dos grupos metodológicos; el primero que ordena las masas de aire según sectores de viento definidos de acuerdo con la influencia en la composición de la masa de aire en el receptor, el segundo agrupa las trayectorias usando una técnica matemática y analiza las concentraciones en el sitio receptor. Dentro del primer grupo se encuentran las metodologías de Función de Contribución Potencial de Fuente (Potential Source Contribution Function-PSCF) y

Trayectoria de Concentración Ponderada (Concentration Trajectory Weighted- CWT) y en el segundo grupo se incluye el análisis de clúster, que es la herramienta usada en este estudio.

2.5.1 Análisis de Clúster

Se conoce como análisis de clúster, análisis de conglomerados o análisis de cúmulos a los métodos multivariados que buscan agrupar a las observaciones, de modo que sean lo más parecidas dentro de su propio clúster, pero diferentes a las que integran a otros conglomerados.

Dentro de los objetivos del análisis de cúmulos se encuentran:

- Investigar la estructura subyacente de los datos, con lo que se gana información y visión que previamente no se tenía, además de identificar características significativas en los datos.
- Comprensión, a partir de organizar y resumir datos dentro de grupos que pueden resultar más comprensibles.
- Clasificación, al determinar el grado de similitud entre los datos (Govender & Sivakumar, 2020).

Una vez que se ha determinado el objetivo de analizar los datos generados empleando esta metodología se agrupan las observaciones, para ello se utilizan dos métodos: el jerárquico y el no jerárquico o de particionado; en el primero las observaciones inician ya sea en un solo clúster que se va dividiendo o en lecturas individuales que se van uniendo a un grupo, en ambos casos el criterio de unión o división es una medida de similitud o distancia, y todos los objetos clasificados son considerados en cada paso del proceso, las salidas de este método se representan como un árbol de aglomeraciones o dendograma, en el cual cada rama representa un paso del algoritmo, este enfoque usualmente es empleado cuando no se conoce el número de conglomerados. El método de particionado divide el grupo de observaciones en k clústeres disjuntos, minimizando la medida de distancia en los datos dentro de cada cúmulo mientras se maximiza la desigualdad entre diferentes clústeres, este método requiere que se conozca de antemano el número de conglomerados en que se dividirán las mediciones (Fleming et al., 2012; Schuenemeyer & Drew, 2010).

Dentro de los métodos jerárquico y de particionado, los procedimientos de Ward y kmedias respectivamente, son comunes. La técnica de Ward está definida por el incremento más pequeño en la suma de cuadrados de error dentro del clúster resultante de la unión de otros dos conglomerados, por ello también se conoce como método de varianza mínima. En cuanto a k-medias, pretende dividir m objetos (las observaciones) en k-particiones (cúmulos), de modo que la suma de cuadrados sea la mínima, la partición de los datos en este método se obtiene de la comparación de cada objeto con la media aritmética de todos los miembros de cada uno de los k-grupos.

Si bien las metodologías descritas suelen usarse con frecuencia de manera independiente, también pueden ajustarse de mejor manera a los objetivos del análisis de clúster, a este respecto Govender y Sivakumar (2020) describen el proceso de clustering de 2 etapas, en el que se incluye el uso de dos procesos de aglomeración combinados, donde la salida del primer método es usada como entrada del segundo, de manera más específica la aglomeración jerárquica es la primera etapa y *k*-medias la segunda. La lógica detrás de combinar dos métodos en este orden es usar el dendograma para elegir el número de clústeres que serán usados como "semillas" en el algoritmo de *k*-medias.

Sin importar la metodología elegida, para la diferenciación entre los objetos que integrarán los conglomerados se usan medidas de disimilitud, similitud o distancia, ejemplos son las distancias de Manhattan, de Mahalanobis, euclidiana y angular, en el caso específico de trayectorias de masas de aire, las dos últimas medidas de distancia son las más usuales.

La aplicación del análisis de clúster a las trayectorias de retroceso o avance resulta en grupos con las mismas direcciones y velocidades de transporte, que se asume que pueden ser representativos de patrones sinópticos específicos. Cada grupo de trayectorias individuales puede ser promediado para producir una trayectoria media que represente la totalidad del patrón del clúster (Govender & Sivakumar, 2020).

Esta metodología se ha empleado para examinar el transporte de largo alcance de contaminantes secundarios en el Reino Unido por Abdalmogith y Harrison en 2005, por Li y colaboradores (2016) para establecer el transporte regional y potenciales fuentes de PM_{2.5} en Taiwán, así como por Johnson et.al. (2007) para la identificación de tendencia en los promedios de O₃ y partículas en Canadá. Para el caso de México no se encontraron estudios que emplearan esta técnica en combinación con las trayectorias de retroceso. En la mayoría de los estudios arriba referidos, la aplicación de grandes cantidades de trayectorias de retroceso acopladas al análisis de clúster permitió identificar regiones y patrones de transporte sinópticos bajo los que se dieron las condiciones de transporte regional o de largo alcance a los sitios de interés estudiados.

2.6 UBICACIÓN DE ESTACIONES DE MONITOREO DE ESTUDIO

Dado el interés de investigar el transporte de $PM_{2.5}$ entre las cuencas atmosféricas de los valles de México y Toluca, se consideraron tres estaciones de monitoreo que por su ubicación y características pudieran ser empleadas para identificar el transporte a nivel regional; dos de ellas dependientes de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico de la

Ciudad de México (Santa Fe-SFE e ININ) y otra de la Red de Monitoreo Atmosférico del Estado de México (San Mateo Atenco-SM). La figura 2.3 muestra la posición en un mapa de las estaciones consideradas, mientras que la Tabla 2.2 presenta las características de las estaciones empleadas donde además se incluyó el entorno de cada una, así como la representatividad atribuida a estas estaciones.

Tabla 2.2	Tabla 2.2 Características de las estaciones de monitoreo de estudio											
Estación	Coordenadas	Altitud	Ubicación	Entorno	Representativida d espacial							
SM	19.28422 N, -99.541667 O	2600 msnm	Ave. Hacienda Tres Marías 260, Col. Santa Elena, San Mateo Atenco, Edo. de México.	Zona habitacional, sin grandes elevaciones.	Vecinal para PM ₁₀ (0.5-4 km) (GEM, 2007b)							
ININ	19.291968 N, -99.380520 O	3082 msnm	Carretera México- Toluca s/n, La Marquesa, Ocoyoacac, Edo. de México	No poblado, zona boscosa.	Urbana (4-20 km) (SEDEMA, 2019)							
SFE	19.357357 N, -99.262865 O	2599 msnm	Av. Carlos Lazo s/n, Col. Prados de la Montaña, Cuajimalpa, CDMX.	Planicie, sin población, zona habitacional	Urbana (4-20 km) (SEDEMA, 2019)							

La estación San Mateo Atenco (SM), si bien se encuentra ubicada en una zona habitacional medianamente poblada, 150m al sur de ella se localiza la Av. Las Torres y 500m al norte la Av. Paseo Tollocan, que son las principales vías de ingreso a Toluca donde desembocan las carreteras 15 y 15D México-Toluca. Al noroeste de SM se ubica el Parque Industrial "Lerma Park", así como el aeropuerto de la ciudad. Estas fuentes podrían representar tanto un aporte de contaminación local significativo como interferencias en el patrón de transporte identificado. Tan solo en Av. Paseo Tollocan se ha estimado un tránsito de casi 100 mil vehículos al día.

Por su parte la zona circundante a la estación Santa Fe (SFE), es un área sin cubierta vegetal superior, solo pasto, rodeada de vialidades de mediana importancia como son, a una distancia de 150 m la Av. Tamaulipas al sur y a 250 m la Av. Carlos Lazo al oeste, al tiempo que la autopista México-La Marquesa recorre de norte a oeste a una distancia de cerca de 1 km de la estación SFE, misma vía que posteriormente se convierte en la carretera

15D México-Toluca, el resto del entorno es en su mayoría habitacional. Se estima que la interferencia sea menor en este caso que en SM.

Finalmente, la estación Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ), que podría verse afectado mínimamente por $PM_{2.5}$ de emisiones locales de resuspensión de polvos y posibles contribuciones de emisiones vehiculares del tránsito vehicular dentro del ININ y de la carretera México-Toluca ubicada hacia el arco noroeste-norte entre 1 y 2 km de estas instalaciones así como algunas cabañas y establecimientos cuyo funcionamiento involucra combustión de leña.

CAPÍTULO 3 MATERIALES Y MÉTODOS

La metodología general que se empleó en este trabajo se muestra en la Figura 3.1, partiendo desde la recuperación de los datos meteorológicos y de contaminantes criterio generados por los SMCA de las Zonas Metropolitanas de la Ciudad de México y Toluca, hasta la generación de los conglomerados de trayectorias para cada estación.



Figura 3.1. Metodología general del trabajo.

Las etapas realizadas en este trabajo se detallan en los siguientes puntos.

3.1 RECUPERACIÓN DE DATOS CRUDOS DE MONITOREO

Los datos de monitoreo atmosférico de contaminantes y parámetros meteorológicos para el año 2017 de los 3 sitios de interés se obtuvieron de diferentes instancias gubernamentales dado que las estaciones se encuentran en jurisdicciones estatales distintas. En todos los casos las bases de datos recibidas se encontraban con la limpieza inicial o sin tratamiento alguno.

Los datos correspondientes a la estación San Mateo Atenco (SM) se obtuvieron de la página web del Sistema Nacional de Información de la Calidad del Aire (SINAICA): <u>https://sinaica.inecc.gob.mx/</u>. Mientras que los datos de monitoreo correspondientes a SFE e ININ se encontraron disponibles en el apartado de *Datos* de la página web de la Dirección de Monitoreo Atmosférico (<u>http://www.aire.cdmx.gob.mx/</u>). En cuanto a las bases de datos meteorológicas se obtuvieron de las mismas fuentes excepto para dirección y velocidad del viento en la estación ININ, donde los datos fueron proporcionados por el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares que cuenta con una torre meteorológica de 30 m de altura y registra estos parámetros.

De las bases de datos descargadas, la resolución temporal más alta en común fue la horaria, para el proceso de limpieza, verificación y validación del periodo completo (año 2017) se seleccionaron datos horarios de $PM_{2.5}$, PM_{10} , CO, O₃ y dirección y velocidad del viento. Sin embargo, todos los análisis se centraron en el periodo que abarcó la campaña de medición CCA-PT17 del 15 de febrero al 14 de marzo de 2017.

La elección de CO y O₃ como parte complementaria del análisis de PM_{2.5} se debió a que ambos contaminantes además de usarse como trazadores de transporte regional (Mao & Talbot, 2004) sus concentraciones suelen tener un comportamiento definido a lo largo del día, lo cual fue usado para caracterizar el comportamiento de los conglomerados y las concentraciones de PM_{2.5} en ellos. El CO es principalmente emitido de manera primaria por procesos de combustión incompleta coincidiendo con los picos de emisión debida a actividades humanas y el O₃ se genera de manera secundaria como producto de la reacción fotoquímica de compuestos orgánicos volátiles y óxidos de nitrógeno presentes en la atmósfera con un pico en las horas de mayor actividad solar cercanas al medio día.

3.2 LIMPIEZA, VERIFICACIÓN Y VALIDACIÓN DE DATOS

A todas las bases de datos de $PM_{2.5}$ y PM_{10} obtenidas se les practicó el proceso de limpieza, verificación y validación de datos basado en los criterios propuestos por el INECC en el Protocolo de Manejo de Datos de la Calidad del Aire (INECC, 2010) y en la experiencia del Grupo Fisicoquímica Atmosférica del Instituto de Ciencias de la Atmósfera y Cambio Climático.

Es importante destacar que, la limpieza de datos únicamente abarca la eliminación de símbolos o banderas que invaliden los datos, estas banderas o símbolos son asignados a eventos que no están dentro de los parámetros de operación normal de los equipos de monitoreo y van desde fallas eléctricas, hasta concentraciones fuera de los límites de calibración del instrumento. La verificación y validación por su parte son procesos de evaluación; en el primero se busca que los datos estén completos, sean correctos y correspondan a los métodos, procedimientos o requisitos establecidos, mientras que el segundo se enfoca en necesidades particulares de un proyecto específico (US-EPA, 2002), los tres procesos son interdependientes y de la correcta aplicación de ellos depende gran parte la calidad de la información que se generará a partir de los datos.

En el Anexo A1 de este trabajo se especifican los pasos seguidos para la limpieza, verificación y validación de datos de $PM_{2.5}$, PM_{10} , O_3 , CO, dirección y velocidad del viento.

3.3 ANÁLISIS EXPLORATORIO DE DATOS

Una vez que las bases de datos de cada sitio de monitoreo estuvieron limpias, verificadas y validadas para el periodo del 15 de febrero al 14 de marzo de 2017, se procedió a la elaboración de un análisis exploratorio de los datos anuales de $PM_{2.5}$, PM_{10} y velocidad del viento, empleando medidas de estadística descriptiva como promedio, mediana, máximo, mínimo y medidas de dispersión como desviación estándar y rango intercuartílico, mismos estadísticos que se obtuvieron para los datos horarios del periodo del 1° de enero al 31 de diciembre de 2017 y cuyos resultados se encuentran en el anexo A2.

Por otro lado, bajo el entendido que un indicador es un parámetro mediante el que es posible representar un conjunto de datos bajo un esquema particular, en el caso de contaminación del aire se pueden tener dos tipos de indicadores: el indicador de comportamiento temporal que permite observar el perfil horario, semanal, mensual, etc. de los contaminantes; y el indicador de cumplimiento normativo, que como su nombre lo indica evalúa el cumplimiento de una norma en relación a un periodo promedio de tiempo específico para cada contaminante.

En este sentido, los datos de $PM_{2.5}$, PM_{10} , O_3 , CO y velocidad del viento de cada estación de interés fueron evaluados temporalmente empleando herramientas como: series de tiempo, perfiles horarios y diarios. La velocidad y dirección del viento fueron también evaluados mediante rosas de viento.

Por su parte los indicadores de cumplimiento normativo de la NOM-025-SSA1-2014 correspondientes a la evaluación de PM del año 2017 emplearon los promedios horarios y de 24 horas de $PM_{2.5}$ y PM_{10} para obtener el grado de cumplimiento en cada una de las estaciones evaluadas, haciendo un énfasis en el periodo de duración del proyecto CCA-PT17.

3.4 GENERACIÓN DE TRAYECTORIAS DE RETROCESO CON GRADS (GRID ANALYSIS AND DISPLAY SYSTEM)

Para la generación de las retro-trayectorias se empleó el software GrADS (Grid Analysis and Display System) desarrollado por el Centro de Estudios Océano-Tierra-Atmósfera de la Universidad George Mason (Center for Ocean-Land-Atmosphere Studies, COLA, Fairfax, VA, USA), y que se describe como una herramienta interactiva para ser usada en el acceso, análisis y visualización de datos de Ciencias de la Tierra. GrADS implementa un modelo de datos de 5 dimensiones: latitud, longitud, nivel y tiempo y una adicional para las mallas y realización de ensambles. Cada conjunto de datos se encuentra dentro de este espacio de 5 dimensiones mediante el uso de un archivo de descripción de datos (COLA, 2015).

El procedimiento usado para calcular las retro-trayectorias y obtener el archivo que las contenía se muestra a mayor detalle en el siguiente diagrama de flujo (Figura 3.2) y en las páginas siguientes.



Figura 3.2. Diagrama de flujo de generación de archivo de trayectorias de retroceso.

La información usada como datos de entrada de la aplicación GrADS fue:

- Script que modela trayectorias de retroceso
- Datos meteorológicos: WRF-Chem 3 Km
- Coordenadas en grados decimales de las estaciones de monitoreo
- Fecha y hora en UTC del valor horario máximo del día de PM_{2.5}
- Duración de trayectoria de 8 horas de retroceso (De Foy et al., 2006).
- Altura de 50 m sobre el nivel del suelo

Los datos meteorológicos empleados se generaron previamente como salida del modelo WRF-Chem y fueron proporcionados por el Dr. Agustín Garcia Reynoso del Instituto de Ciencias de la Atmósfera y Cambio Climático para el periodo del proyecto CCA-PT17. Las horas y fechas de los máximos de PM_{2.5} fueron extraídos de las bases de datos tratadas después de realizar el análisis exploratorio de datos. Se analizaron en términos de valores máximos horarios cada uno de los días correspondientes al periodo de la campaña CCA-PT17 del 15 de febrero al 14 de marzo del 2017, obteniendo 29 datos de PM_{2.5} con una concentración, fecha y hora asociada para cada estación de estudio. En total se generaron 87 retro-trayectorias características de los horarios de máxima concentración del periodo.

El tiempo de duración de la trayectoria fue de 8 horas, basándose en los estudios de De Foy y colaboradores (2006), donde mencionan que los tiempos de residencia de las masas de aire dentro de la cuenca de Valle de México son menores a 12 horas.

Después de obtener las trayectorias de retroceso con GrADS, más información sobre este proceso se ubica en el anexo A3, se generó un archivo de texto con la información calculada donde, a cada hora correspondía un punto con latitud y longitud definida. Dado que el archivo de texto que contiene las coordenadas de los puntos finales de las

trayectorias es requerido para el análisis posterior, fue necesario adecuarlo de modo que su formato resultase apropiado para el post procesamiento en el software *openair*. Ésta herramienta de software es un paquete de funciones del lenguaje de programación R cuyo propósito es analizar datos de calidad del aire o de manera más general datos de composición atmosférica. *openair*, fue desarrollado por el Grupo de Investigación Ambiental del King´s College London en 2015 (Carslaw, 2015), y fue usado en este estudio para el análisis de las retro-trayectorias y de clustering.

Los requerimientos para que los datos de salida de GrADS pudieran ser analizados en *openair* se muestran en la Tabla 3.1, es decir que los archivos de trayectorias tuvieron que ser llevados a este formato como archivos .csv, en la figura 3.3 se presenta un ejemplo de las columnas en el archivo.

Tabla 3.1 C ser procesa	Tabla 3.1 Campos y columnas necesarias en un archivo de trayectorias .csv paraser procesado por el paquete <i>openair</i>										
Nombre de Columna	Datos proporcionados	Justificación de datos proporcionados									
Receptor	1	Número de Receptor, solo se manejó un sitio receptor por sitio de muestreo									
Year	2017	Año de la trayectoria									
Month	2 (Feb) / 3 (Mzo)	Mes de la trayectoria									
Day	15 a 28 (Feb) y 1 a 15 (Mzo)	Dia de la trayectoria									
Hour	1 a 24	Hora de la trayectoria									
Hour.inc	0 a -8	Tiempo de retroceso de la trayectoria									
Lat	19.291968	Latitud en formato decimal, cuando el valor de hour.inc es 0 corresponde al sitio de muestreo, las siguientes a las horas de retroceso									
Lon	-99.380520	Longitud en formato decimal, cuando el valor de hour.inc es 0 corresponde al sitio de muestreo, las siguientes a las horas de retroceso.									
Height	50 m	Altura de la trayectoria									
Pressure	565 kPa	Presión de la trayectoria, cambia conforme a la presión atmosférica del sitio de muestreo									
Date2	2017/02/15 09:00	Fecha de la trayectoria tomando en cuenta el tiempo de retroceso, cambia conforme avanza la trayectoria.									

Tabla 3.1 Continua										
Date	2017/02/15 09:00	Fecha de inicio de la trayectoria, constante durante toda la trayectoria.								

	А	В	с	D	Е	F		G	Н	I.	J	к	L
1	receptor	year	month	day	hour	hour.inc	lat		lon	height	pressure	date2	date
2	1	17	2	15	17	0	1	19.28422	-99.541667	53	730	15/02/2017 17:00	15/02/2017 17:00

Figura 3.3. Ejemplo de archivo .csv de trayectorias acondicionado para su procesamiento en *openair*.

3.5 ANÁLISIS DE TRAYECTORIAS

Contando ya con las bases de datos de trayectorias de retroceso acondicionadas fue posible representarlas espacialmente sobre una malla con esquina sureste (18° N, 97°O) y esquina noroeste (21°N,101°O), cuyas dimensiones fueron determinadas empíricamente de modo que pudieran cubrir todas las trayectorias por cada sitio receptor (sitio de muestreo).

Posterior a la representación de las trayectorias de manera geoespacial se procedió a emplearlas de las siguientes formas; primero como un acercamiento a los posibles orígenes de las masas de aire que arribaban a los sitios, y; en segundo lugar, como el paso de inspección visual previo a la determinación por método jerárquico del número mínimo de conglomerados que serían esperados por sitio.

3.6 ANÁLISIS DE CLÚSTER

El procedimiento de análisis de clúster usado en este trabajo fue de dos etapas. Inicialmente, con un proceso de aglomeración jerárquico con el método de Ward seguido de otro de particionado con la metodología de *k*-medias.

En la figura 3.3 se ilustra el procedimiento realizado en esta etapa del análisis de clúster para cada sitio de muestreo, que abarcó también la obtención de mapas de trayectorias promedio y el acoplamiento de los clústeres a las concentraciones de $PM_{2.5}$ de cada sitio con lo cual se realizó un análisis estadístico como se explicará más adelante.



Figura 3.4. Diagrama de flujo del procedimiento de análisis de clúster realizado en este trabajo.

Para proceder con el análisis de conglomerados fue necesario contar con los datos de monitoreo de $PM_{2.5}$ de cada sitio, también con un formato especifico, mismo que se detalla en la Tabla 3.2 y se muestra en la figura 3.5 como ejemplo.

Tabla 3.2 Campos y columnas necesarias en un archivo de contaminantes .csv paraser procesado por el paquete <i>openair</i>								
Nombre de Columna	Datos proporcionados	Justificación de datos proporcionados						
Code	SM	Código de identificación de la estación						
site	San Mateo Atenco	Nombre de la estación de monitoreo						
PM2.5	57	Concentración de los contaminantes en µg m ⁻³ para PM.						

Después de "PM2.5" es posible colocar más columnas con contaminantes o parámetros meteorológicos.

	А	В	С	D	E	F	G	н	I.
1	date	code	site	pm10	pm2.5	со	o3	WS	wd
2	15/02/2017 06:00	SM	San Mateo A	140	57	0.91	6	0.5	213

Figura 3.5. Ejemplo de archivo .csv de contaminantes acondicionado para su procesamiento en *openair*.

Una vez que los datos de monitoreo de SM, ININ y SFE se adaptaron con el formato deseado a la par de los archivos de trayectorias para el periodo de 15 de febrero al 14 de

marzo de 2017, se procedió a ingresar ambas bases de datos en R para ser combinadas y así obtener la asociación entre las trayectorias y las concentraciones de PM_{2.5} en cada clúster.

El paquete *openair* cuenta con la función que permite realizar la agrupación en cúmulos de trayectorias de retroceso o avance, tomando como parámetro de agrupación la distancia euclidiana o la distancia angular existente entre conjuntos de coordenadas que forman las trayectorias e integrando así los conglomerados.

La distancia euclidiana entre dos trayectorias está dada por la ecuación 1, donde X_1 , Y_1 y X_2 , Y_2 son las coordenadas de latitud y longitud de las trayectorias 1 y 2, respectivamente, *n* es el número de puntos en la trayectoria de retroceso (1 por cada hora):

$$d_{1,2} = \left(\sum_{i=1}^{n} \left((X_{1i} - X_{2i})^2 + (Y_{1i} - Y_{2i}) \right)^2 \right)^{1/2}$$
Ecuación 1

La distancia angular por su parte es una medida de similitud entre los puntos de dos trayectorias en términos de su ángulo desde el origen, por ejemplo, la localización de arranque de las trayectorias.

La distancia angular está dada por las ecuaciones 2-2.3, donde X_0 y Y_0 son las coordenadas de la localización a ser estudiada que puede ser el punto de inicio de la trayectoria; X_1 , X_2 , Y_1 y Y_2 se mantienen como las coordenadas de las trayectorias 1 y 2 (Carslaw, 2015).

$$d_{1,2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \cos^{-1} \left(0.5 \frac{A_i + B_i + C_i}{\sqrt{A_i B_i}} \right)$$
 Ecuación 2

$$A_i = (X_1(i) - X_0)^2 + (Y_1(i) - Y_0)^2$$
 Ecuación 2.1

$$B_i = (X_2(i) - X_0)^2 + (Y_2(i) - Y_0)^2$$
 Ecuación 2.2

$$C_i = (X_2(i) - X_1(i))^2 + (Y_2(i) - Y_1(i))^2$$
 Ecuación 2.3

Para este estudio fue empleada la distancia angular pues fue de especial interés relacionar los puntos de origen de las trayectorias a fin de poder asociarlos con regiones cuyas emisiones posiblemente impacten alguna de las cuencas atmosféricas objeto de este estudio.

Debido a que el método de Ward con distancia euclidiana es un proceso de *clustering* menos sensible a "outliers" que se dan usualmente en el monitoreo de calidad del aire y proporciona conglomerados mucho más compactos (Tufféry, 2011), se aplicó como primer paso y se obtuvo un dendograma para cada estación de monitoreo, mismo que al ser interpretado proporcionó el número de cúmulos para el sitio de evaluación.

Un ejemplo de dendograma se muestra en la figura 3.4, en el eje horizontal se localizan las observaciones y en eje vertical se encuentra el parámetro de diferenciación de observaciones, que suele ser distancia o similitud. En el gráfico es posible observar cómo se

van agrupando los cúmulos, de modo que cada línea horizontal representa uno que está formado por las observaciones agrupadas debajo de la línea; la longitud de cada recta vertical indica las unidades de distancia que separan a cada clúster. Bajo el entendido de que el análisis de cúmulos busca que los grupos formados sean lo más diferentes entre ellos, la mayor distancia entre líneas horizontales representa un mayor grado de contraste entre clústeres.

En la mayoría de las representaciones de dendogramas se finaliza o inicia el algoritmo a partir de un clúster único, dividido en dos grupos diferenciados por la menor similitud o máxima diferencia o, por lo que se evalúa el paso previo donde la mayor distancia entre grupos esté presente y se determina donde es más adecuado "cortar" el dendograma, para lo cual usualmente se parte de una inspección visual de la representación gráfica de los datos.

La figura 3.6 presenta un ejemplo de dendograma obtenido de un método jerárquico. En la parte superior del gráfico se observa una sola línea horizontal que representa el clúster único formado al final de la aplicación de algoritmo y que se encuentra unido por líneas verticales a otros dos conglomerados que se diferencian claramente, pero dentro de ellos es posible distinguir 3 grupos de diferentes tamaños que se obtienen después de cortar el dendograma en su antepenúltima etapa. Es factible ir bajando de nivel y obteniendo cada vez más conglomerados hasta que se llegara a tener tantos cúmulos como observaciones iniciales.

Como siguiente etapa de la metodología usada en este trabajo, se utilizó la salida del clustering jerárquico obtenida a través de los dendogramas para la determinación de la cantidad de cúmulos por estación de monitoreo que serían usados en la siguiente etapa del proceso de clustering de dos etapas.

Es decir, el corte del dendograma se realizó tomando como referencia el valor de similitud presentado gráficamente en el eje vertical donde ocurrió un cambio de signo o un cambio abrupto en el valor identificado en este parámetro de similitud entre conglomerados. También se consideró la cantidad de grupos observados durante el análisis visual de trayectorias previo para ser usado como entrada del método de particionado no jerárquico de *k*-medias y cuya medida de agrupación fue la distancia angular, esto debido al interés en la dirección donde se originaron las trayectorias que llegaron al sitio (Li et al., 2017; Mijic et al., 2012). Esta etapa fue realizada en *openair* y se generó para cada estación una trayectoria promedio por cada cúmulo, que posteriormente serían representadas de manera geoespacial.



Pares de coordenadas de origen de retro-travectoria

Figura 3.6. Ejemplo de dendograma obtenido con el método de Ward, y distancia euclidiana, la línea roja representa la línea de "corte" de dendograma que permite diferenciar los 3 grupos o clústeres.

3.6.1 Pruebas estadísticas

Una vez producidos los mapas mostrando el recorrido de cada clúster de retro-trayectorias, se procedió a realizar una evaluación final del número de cúmulos por sitio basándose en la presencia de diferencias significativas en las concentraciones promedio de PM_{2.5} en los conglomerados asociados a cada sitio receptor, para ello se aplicaron pruebas estadísticas.

Las pruebas no paramétricas usadas fueron Kruskal-Wallis y la comparación por pares a través de la prueba de Dunn (Abdalmogith & Harrison, 2005; Ghosh et al., 2015; Salvador et al., 2008).

La prueba no-paramétrica de Kruskal-Wallis es comúnmente usada como una técnica para probar la hipótesis nula de que varias muestras provienen de una misma población, es decir que sus medianas son iguales, la hipótesis alternativa en este contexto se presenta como que no todos los clústeres son idénticos en términos de la mediana de su concentración de $PM_{2.5}$, por ello para encontrar los grupos de trayectorias que son significativamente diferentes entre sí se aplicó la prueba de Dunn. En ambos casos se consideró un nivel de significancia de α = 0.05.

Aquellos cúmulos donde no se observó diferencia estadística se unieron en un solo clúster, siempre y cuando los conglomerados a ser unidos presentaran comportamientos similares en su trayectoria media. En los casos donde lo anterior no sucedió se conservaron el total de

grupos. Una vez concluido el proceso de combinación de clústeres se procedió a realizar nuevamente las pruebas estadísticas.

Contando con el número óptimo de cúmulos se generaron representaciones de las trayectorias medias de cada clúster que permitieron identificar posibles áreas de origen de contaminantes, así como patrones de desplazamiento de las masas de aire en las cuencas atmosféricas de interés. Además, se realizó un análisis estadístico de las concentraciones de PM_{2.5} presentes en cada clúster que incluyó el cálculo de promedios, máximos y mínimos, así como desviación estándar.

CAPÍTULO 4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 LIMPIEZA, VERIFICACIÓN Y VALIDACIÓN DE DATOS

La cantidad esperada de datos horarios cada una de las 3 estaciones durante el periodo de CCA-PT17 fue de 672 datos horarios para cada parámetro, donde la mayor pérdida de datos fue experimentada por SFE con un 7% de lecturas horarias para PM_{2.5}.

Durante el proceso de limpieza y verificación, además de corroborar la presencia de datos completos y confiables, las bases de datos de cada estación de monitoreo fueron colocadas en iguales unidades de medición e intervalos de tiempo, de modo que $PM_{2.5}$ estuviera en $\mu g m^{-3}$, dirección del viento en grados, velocidad el viento en m s⁻¹ y los gases contaminantes como O₃ en ppb y CO en ppm, todos ellos en intervalos horarios.

4.2 ANÁLISIS EXPLORATORIO DE DATOS

Los parámetros estadísticos básicos calculados a partir de las mediciones horarias de PM_{2.5} y velocidad del viento en las estaciones de ININ, SFE y SM fueron: número de mediciones, valor mínimo, máximo, media aritmética, cuartiles (Q1, Q2 y Q3), rango intercuartílico y desviación estándar, abarcando el periodo de campaña del proyecto CCA-PT17 del 15 de febrero al 14 de marzo del 2017, los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 4.1.

Se observó que los estadísticos calculados para $PM_{2.5}$ de la estación SM tomaron los valores más altos de las tres estaciones, por su parte los valores menores fueron medidos en ININ. En general los cuartiles calculados tanto para $PM_{2.5}$ como para velocidad del viento (VV), agruparon la mayor cantidad de datos entre los cuartiles 1 y 3, con presencia baja de valores atípicos, condición confirmada por las estimaciones de la mediana (Q2), que en todos los casos fue marginalmente menor que el promedio.

Los valores del tercer percentil y el máximo fueron muy diferentes entre sí, implicando la existencia de datos extremos que como se había mencionado ejercieron un efecto poco perceptible sobre la media.

Las medidas de dispersión en los tres sitios fueron variadas y presentaron valores considerables, esta situación se explica con la variabilidad de las emisiones del contaminante durante el día, además de su dependencia de parámetros meteorológicos que no son constantes a lo largo del tiempo como son la radiación solar, humedad, precipitación, velocidad y dirección de los vientos, entre otros.

En cuanto a la velocidad del viento, los promedios más bajos se registraron en SM y los más altos en SFE, mediana y promedio presentaron valores muy cercanos entre sí en los tres sitios, indicando baja presencia de rachas de viento, cabe señalar que la mayor parte de los datos de velocidad de viento se agruparon entre vientos de baja intensidad (3 ms⁻¹) y calmas (0.5 m s⁻¹).

Tabla 4.1 Estadística descriptiva de parámetros horarios de PM2.5 y												
velocidad del viento medidos por estación durante el periodo de la campaña												
CCA-PT17												
Sitio	Ν	Min	Media	Max	Q1	Q2	Q3	RIC	DS			
PM _{2.5} (μg m ⁻³)												
SM	654	15.0	45.3	160.0	32.3	42.0	53.8	21.5	18.9			
ININ	643	2.0	15.2	60.0	9.0	14.0	20.0	11.0	9.1			
SFE	623	2.0	19.3	66.0	11.0	17.0	25.0	14.0	10.9			
		VEI	LOCIDAI	DEL VI	ENTO (m	ı s⁻¹)						
SM	645	0.4	1.6	5.4	0.8	1.4	2.2	1.4	1.0			
ININ	639	0.02	2.1	7.1	1.1	1.9	2.8	1.7	1.2			
SFE	671	0.4	2.5	6.9	1.7	2.4	3.0	1.3	1.1			
Min= Mínimo	o, Max=	Máximo	, DS=Des	viación E	stándar, Q	2 = med	iana, Q1	-Q3=Cı	ıartil			
1-3, RIC= Ra	ngo Inte	rcuartil.										

Se puede asumir que, en promedio los vientos en cada zona de estudio fueron de baja a moderada intensidad, con presencia de rachas de mayor intensidad, aunque de manera poco frecuente, implicando que los contaminantes que estuvieran estancados o trasladándose lentamente dentro del valle posteriormente pudieran ser transportados a mayores distancias hacia dentro o fuera del Valle de México, Valle de Toluca o a través de la Sierra de la Cruces por vientos fuertes.

Entonces, considerando los valores promedio mínimos de velocidad del viento en el periodo de campaña de medición y el hecho de que la distancia en línea recta entre las estaciones de estudio es apenas mayor a 32 km, se supuso que una masa de aire saliente de SM o SFE que pasa por ININ podría llegar a las inmediaciones de SFE o SM respectivamente en un periodo de 6 horas o más dependiendo de la trayectoria que se presente y sin considerar el cambio de altitud y orografía. Este tiempo resulta consistente con el considerado por De Foy en su estudio sobre la ventilación de la cuenca de la Ciudad de México (De Foy et al., 2006).

Los parámetros estadísticos calculados para $PM_{2.5}$, PM_{10} , O_3 y CO de manera anual y para el periodo de CCA-PT17 se encuentran en el anexo A2, en las tablas A2.1 y A2.2.

Como parte del análisis exploratorio de datos se generaron series de tiempo de PM_{2.5} para SM, ININ y SFE, que se muestran en la Figura 4.1 y corresponden al año 2017 incluyendo el periodo de CCA-PT17.



Figura 4.1. Series de tiempo de promedios horarios $PM_{2.5}$ para el año 2017 en las estaciones SM (a), ININ (b) y SFE (c), la zona enmarcada en amarillo muestra el periodo de la campaña de monitoreo CCA-PT17.

Para el caso particular de SM, es posible apreciar valores atípicos alrededor de 300 μ g m⁻³ durante las primeras horas del día 1 de enero de 2017, esto fue atribuido a las emisiones producto de la quema de cohetes y leña que se da por el festejo de fin de año, así mismo no se descarta una quema en las inmediaciones de la estación que pudo haber producido los valores de PM_{2.5} registrados durante el día 1º de enero.

Se pudo observar en las tres estaciones un comportamiento estacional, más pronunciado en la estación SM debido a los altos valores que la concentración de $PM_{2.5}$ presentó. Los valores más altos del contaminante de interés se dieron durante la estación seca y los más bajos durante la época de lluvias de junio a octubre.

En las series de tiempo anuales, además fue posible identificar periodos de valores extremos en fechas como 1° y 6 de enero, 24 y 31 de diciembre, lo cual es posible atribuir a los periodos de festividades navideñas.

4.2.1 Cumplimiento normativo

De acuerdo con la Norma Oficial Mexicana *NOM-025-SSA1-2014: Valores límite permisibles para la concentración de partículas suspendidas* PM₁₀ y PM_{2.5} *en el aire ambiente y criterios para su evaluación*, se realizó la evaluación de promedios de 24 h y anuales en los tres sitios, con el objetivo principal de conocer si los valores de partículas medidos en los sitios de interés estaban dentro de los especificados en la normatividad.

Las gráficas de la evaluación normativa para el promedio de 24h de $PM_{2.5}$ durante el año 2017 incluido el periodo de CCA-PT17 por sitio se muestran en la Figura 4.2, las correspondientes de PM_{10} se ubican en la figura A2.1 del anexo A2.

En la estación SM se observó el mismo comportamiento durante el año que el presentado con valores horarios tal como se muestra en la figura 4.1 (a), pero en este caso se observa una mejor definición de las épocas del año, de modo que es posible distinguir las concentraciones máximas en los periodos de noviembre-diciembre y febrero en secas frías, seguido del periodo de marzo a mayo (secas calientes), con un descenso en los meses de junio a octubre correspondiente a la época de lluvias, sin embargo aún en ese periodo de menor concentración se presentaron algunos días que rebasaron la norma.

En SM durante el 2017, se contabilizaron 149 días con valores iguales o mayores a 45 μ g m⁻³ de PM_{2.5} (41% del año). En cuanto a la NOM asociada al promedio anual (12 μ g m⁻³), este tampoco fue cumplido pues el promedio de las mediciones ascendió a 42.7 μ g m⁻³.

En la estación ININ, Figura 4.2 (b), no se presentó ningún valor por encima de la norma diaria de $PM_{2.5}$, en cuanto a la evaluación de cumplimiento anual, no fue posible realizarla tal como lo señala la normatividad debido a que no se contó con el mínimo del 75% de

datos diarios para tal propósito. Dado que la evaluación normativa depende del cálculo diario y anual, al no contar con alguno se consideró como un incumplimiento, por lo tanto, el sitio de ININ no cumplió con la norma de calidad del aire para PM_{2.5} y PM₁₀.



Figura 4.2. Evaluación de cumplimiento de la NOM para $PM_{2.5}$ en promedio de 24h para el año 2017 en las estaciones SM (a), ININ (b) y SFE (c). El valor límite de 45 µg m⁻³ está marcado con una recta roja, el periodo de CCA-PT17 se encuentra con un marco amarillo.

Finalmente, la estación ubicada en Santa Fe, Figura 4.2 (c), de igual manera que SM e ININ presentó un comportamiento diario similar al presentado en la serie de tiempo horaria. Con respecto a la evaluación de la norma anual, los valores de PM_{10} y $PM_{2.5}$ anuales fueron de 39.5 y 21.3 µg m⁻³ respectivamente, donde el valor promedio anual obtenido para la fracción fina fue casi el doble del normado. Tampoco en este caso la estación cumplió con la norma de calidad del aire evaluada.

Para el periodo de CCA-PT17, ninguno de los tres sitios presentó concentraciones correspondientes al máximo de concentración diaria anual, pero la estación SM mostró 13 días por encima de la norma de calidad del aire de 24h, mientras que SFE e ININ no presentaron ningún día excediendo este criterio. Este periodo se muestra en la figura 4.2 señalado en un marco amarillo.

En la Tabla 4.2 se presenta un resumen de la evaluación normativa de los tres sitios de muestreo empleados en este estudio, los valores mostrados para ilustrar el promedio de 24 h corresponden al percentil 95 de valores diarios.

Tabla 4.2 Resumen de cumplimiento en SM, ININ, SFE de NOM-025 SSA1-2014para el 2017												
ContaminantePeriodoLímiteSMININSFE												
	Promedio	(µg m ⁻³)										
PM ₁₀ (μg m ⁻³)	24 h	75	131	42	61							
	Anual	40	75.3	D.I	39.5							
PM _{2.5} (µg m ⁻³)	24 h	45	68	25	37							
	Anual	12	42.7	D.I.	21.3							

D.I. Datos Insuficientes

De acuerdo al análisis realizado, es posible comentar que durante 2017, la población en el entorno representativo de las estaciones de monitoreo de SFE y SM, estuvo expuesta de manera crónica y aguda a concentraciones altas de partículas, aunque de forma especialmente severa en San Mateo Atenco pues sus concentraciones máximas diarias tanto de PM₁₀ como PM_{2.5} representaron el doble del valor recomendado, mientras que sus concentraciones promedio anuales de PM_{2.5} son cerca de 4 veces lo normado. Dichas concentraciones podrían ser el resultado de la influencia de la actividad urbana e industrial local cercana y la actividad vehicular pesada de la avenida Paseo Tollocan, pues cabe señalar que esta estación se encuentra viento debajo de dicha avenida en la colonia Santa Elena, es importante no descartar la posible contribución de niveles de fondo acarreados

por las parcelas de aire desde otras regiones dentro y fuera de la cuenca atmosférica del Valle de Toluca.

4.2.2 Comportamiento Temporal

La evaluación de la tendencia temporal de los contaminantes incluyó la generación de indicadores del comportamiento de los promedios horario y diario. En las figuras 4.3 a 4.5 se presentan los resultados obtenidos para $PM_{2.5}$ y velocidad del viento comparando las 3 estaciones.

4.3.2.1 Comportamiento Promedio Horario

Las figuras 4.3 a 4.8 fueron generadas con datos anuales. Sin embargo, el análisis del comportamiento horario de los días incluidos durante el periodo de campaña no mostró diferencias evidentes con el observado de manera anual, por lo cual se puede considerar que este es representativo también del periodo de 15 de febrero-14 de marzo de 2017.



Figura 4.3. Perfiles horarios de $PM_{2.5}$ en rojo (a) y Velocidad del Viento (VV) en verde (b) para SM para el año 2017.



Figura 4.4. Perfiles horarios de $PM_{2.5}$ en rojo (a) y Velocidad del Viento (VV) en verde (b) para ININ para el año 2017.



Figura 4.5. Perfiles horarios de $PM_{2.5}$ en rojo (a) y Velocidad del Viento (VV) en verde (b) para SFE para el año 2017.

Tal como se muestra en la Figura 4.3 (a), el comportamiento promedio horario de $PM_{2.5}$ en SM fue más unimodal que bimodal, con el valor máximo diario entre 8:00-12:00 y el segundo pico de menor magnitud que comenzó a formarse a las 19:00. Este comportamiento se había observado anteriormente en la ZMVT (GEM, 2018; Martínez Vázquez, 2017), y se había atribuido a la dinámica poblacional diaria del sitio, en aparente asociación con los horarios pico de tránsito vehicular en la ZMVT que son 07:00-10:00 h, 12:00-15:00 y de 17:00-20:00 (Secretaria de Desarrollo Urbano y Metropolitano, 2018). Sin embargo, sólo el inicio del pico nocturno parece atribuirse al tráfico vehicular. San Mateo refleja la influencia tanto de la actividad vehicular, fotoquímica y meteorológica del Valle de Toluca. El máximo a media mañana, puede ser consecuencia del efecto de rompimiento de la capa de inversión y del desarrollo turbulento de la capa de mezcla, lo cuál arrastra a los contaminantes atrapados arriba de ella a la superficie, mezclándolos con las emisiones matutinas que se dispersan hacia el Este de Toluca, además de que la actividad fotoquímica de producción de aerosoles está en su fase más intensa. La ausencia de un pico de PM_{2.5} a la hora del tráfico matutino puede deberse a que se confunde con la dinámica antes mencionada.

Poco antes del mediodía la capa de mezcla sigue en desarrollo y el mezclado turbulento con aire más limpio de mayores alturas es favorecido, además del posible arribo de parcelas de aire más limpias de otras zonas rurales del valle lleva a una caída en los niveles de $PM_{2.5}$. Al anochecer, inicia la reconstitución de una nueva capa de inversión que atrapa las emisiones de este periodo, para restablecer una concentración nocturna que alcanza un máximo a media noche, y presentar una ligera disminución conforme la madrugada avanza. La concentración de fondo nocturna está en el rango entre 40 y 50 µg m⁻³ en promedio horario que es alto.

Justo durante la noche y hasta poco antes del amanecer se dan las intensidades de viento mínimas tal como lo muestra el perfil de viento (Figura 4.3 (b)). Mientras que cerca de las 15:00h, en asociación con la ocurrencia de una mayor turbulencia por el calentamiento máximo de la superficie que favorece una mayor dispersión además de una capa de mezcla elevada, la concentración del contaminante baja.

Para el caso de ININ (Figura 4.4 (a)), el promedio de las PM_{2.5} presentó un comportamiento unimodal, que inicia por la mañana llegando a su pico a las 16:00h continuando con su descenso hasta la madrugada del día siguiente. La ausencia del pico matutino involucra dos situaciones, la primera es que la zona de Salazar, Edo. de México donde se ubica ININ, se encuentra escasamente poblada y solo queda bajo la influencia de la carretera México-Toluca, y la segunda es que durante la noche y casi media mañana la zona queda aislada de la influencia de las emisiones matutinas y nocturnas que se generan en el Valle de Toluca y el Valle de México al ubicarse por encima de la capa de inversión superficial que se conforma en ambos valles (México y Toluca), lo que impide el mezclado a mayores altitudes. Una vez que el calentamiento solar propicia el desarrollo de la capa de mezcla en

los valles, inicia el mezclado turbulento vertical que a su vez va asociado al transporte advectivo de masas de aire ricas en partículas finas de emisiones primarias y en aerosoles secundarios a las partes elevadas de la Sierra de las Cruces. Este efecto de turbulencia se observa en el perfil del viento en el ININ que tiene el máximo en torno al mediodía (figura 4.4 (b)).

Una vez que la capa de mezcla alcanza y rebasa el parte aguas de la Sierra, la intensidad de viento se estabiliza y el transporte advectivo se sostiene. A partir de este momento la intensidad de viento tiende a disminuir y los niveles de $PM_{2.5}$ a incrementarse. El hecho de que se sostenga una pendiente positiva en el aumento de las concentraciones de $PM_{2.5}$ puede asociarse a la llegada paulatina retrasada de masas de aire ricas en contaminantes de cualquiera de los dos valles enriquecida con algunas contribuciones de aerosoles de origen biogénico locales y del mezclado de partículas envejecidas acarreadas por los vientos a este nivel de altura. El máximo se presenta hasta media tarde cuando la declinación en la energía solar ya no puede sostener el mezclado turbulento ni el transporte advectivo a la altitud del ININ.

Después de las 16:00 la capa límite regional pierde fuerza y disminuye su tamaño reconformándose rápidamente una nueva capa de inversión sobre la superficie de los valles (Whiteman et al., 2000), situación que puede ser percibida con el descenso en la velocidad del viento acompañado del lento declive de la concentración durante la noche y llegando a valores mínimos en las madrugadas como consecuencia de que al quedar el ININ por arriba de la capa de inversión tiene un escaso aporte de emisiones locales y de transporte de contaminantes a estas elevaciones, así como a una ventilación sostenida de vientos catabáticos nocturnos que si bien son ligeros, favorecen la dispersión de los contaminantes que pudieron quedar atrapados por encima de la capa de inversión, además es necesario considerar que el depósito de PM en la vegetación puede contribuir a disminuir su concentración.

En SFE, curva en rojo en Figura 4.5 (a), al igual que en ININ, se aprecia un comportamiento horario de $PM_{2.5}$ aparentemente unimodal que inicia su conformación cerca de las 6:00h, coincidiendo con el horario pico de actividad matutina y continua del entorno de la estación que es detectado con concentraciones que pueden ser atribuidas al tránsito local que se observa con una pequeña elevación en los niveles a las 7 de la mañana, para después que inician el mezclado turbulento, el desarrollo de la capa de mezcla y el transporte advectivo de las masas de aire con partículas ya emitidas y en proceso de formación secundaria se desplazan hacia la ladera poniente de la Sierra de las Cruces, incrementando por pocas horas los niveles hasta alcanzar el valor más alto entre las 12:00 a 14:00h en forma de meseta después de lo cual disminuye lentamente hasta las 18:00h. La meseta que se conforma representa el máximo posible de $PM_{2.5}$ generado dentro del valle

que ventila hacia afuera a través de la Sierra de las Cruces. Al anochecer y de la misma forma que en ININ, el nivel de altitud de la estación SFE (2599 msnm), lleva a que por las mañanas y en la noche SFE quede en el límite o por arriba de la capa de inversión que se establece sobre el Valle de México (2240 msnm), evitando la influencia de las emisiones matutinas y nocturnas del valle en las mediciones.

El perfil de viento (Figura 4.5 (b)), mostró aumento constante desde la mañana en asociación con el desarrollo de la capa de mezcla y la turbulencia acompañante, y continuó intensificándose hasta un máximo después de las 18:00h, reflejando la ocurrencia de procesos de ventilación intensos por vientos anabáticos en lado oriente del parte aguas de la Sierra de las Cruces, lo que a su vez pudo favorecer una mayor dispersión de los contaminantes por acción del viento después de las 16 horas.

En general, se puede observar la diferencia en el perfil horario de $PM_{2.5}$ entre los tres sitios. Mientras que en SM es claro que representa las condiciones de emisión, transporte y química atmosférica del Valle de Toluca, SFE e ININ presentaron un comportamiento unimodal relativamente similar, aunque desfasado en el tiempo. Aún así, las concentraciones en SFE fueron mayores que en ININ, posiblemente por el depósito de parte de ellas sobre las zonas forestales a su paso a través de la vegetación.

La explicación anterior sobre las posibles causas del perfil diurno promedio de las concentraciones de PM_{2.5} se fortaleció utilizando el patrón horario de CO y O₃ de cada sitio, mismos que se muestran en las figuras 4.6 a 4.8, tomando en cuenta que el CO es un contaminante primario con tiempo de vida relativamente largo que usualmente es usado como trazador de emisiones locales producto de la quema de combustibles fósiles o biomasa y relacionado a actividades antropogénicas, mientras que el O₃ es un contaminante secundario con tiempo de vida de horas con un comportamiento horario bien conocido y definido en gran medida por la radiación solar y la magnitud de las emisiones de sus precursores.

En la figura 4.6 a 4.8 se muestran los perfiles horarios de $PM_{2.5}$ (a), O_3 (b), CO (c). En el escenario encontrado para SM y SFE (figuras 4.6 y 4.8 (b) y (c)), el monóxido de carbono y el ozono mostraron un comportamiento un tanto similar al de zonas urbanas. El CO con un máximo matutino en ambos casos, con una segunda elevación de menor intensidad nocturna en SM y vespertina en SFE.



Figura 4.6 Perfil horario de concentraciones de $PM_{2.5}$ (a), O_3 (b) y CO (c) para el periodo de 2017 en SM.



Figura 4.7 Perfil horario de concentraciones de $PM_{2.5}$ (a), O_3 (b) y CO (c) para el periodo de 2017 en ININ.



Figura 4.8 Perfil horario de concentraciones de $PM_{2.5}$ (a), O_3 (b) y CO (c) para el periodo de 2017 en SFE.

En la estación SM los máximos de $PM_{2.5}$ no coinciden con los picos de CO ni O₃. El máximo de $PM_{2.5}$ se presenta después del máximo de CO, lo que implica que no tienen el mismo origen vehicular. La ocurrencia del máximo en $PM_{2.5}$ se presenta a media mañana, lo que implica la contribución de aerosoles secundarios y/o la adición de partículas transportadas, tal y como se infirió previamente. Por la noche, cuando la estabilidad atmosférica es significativa, hay acumulación tanto de CO como de $PM_{2.5}$ debido a la reducción en el mezclado vertical por la reconformación de la capa de inversión, al tráfico, emisiones industriales y emisiones urbanas domésticas nocturnas.

Mientras que en SFE, figura 4.8 (c), se aprecian dos máximos de CO por la mañana, aunque su magnitud es de poco menos de dos veces la magnitud que en SM. El primero se asume que sea más un producto de la influencia del pico del tráfico local, mientras que el segundo es reflejo de la influencia del crecimiento turbulento de la capa de mezcla que al alcanzar el nivel de altitud de SFE lleva a registrar los niveles de esta expansión vertical, tal y como se interpretó para las PM_{2.5}. Sin embargo, en torno a las 11 de la mañana la capa de mezcla rebasa el nivel del parte aguas de la Sierra de la Cruces y ocurre una ventilación súbita de la mega-masa de aire contenida hasta entonces dentro del valle llevando a una reducción rápida de los niveles medidos de contaminantes primarios como el CO, pero no de los secundarios que se siguen transformando. Una vez que anochece se observa la influencia del tráfico nocturno local con un pequeño pico que no persiste ya que en este periodo ocurre la transición de vientos anábaticos a catabáticos que regresa parcelas de aire de la montaña al valle que previamente pasaron.

El O₃ por su parte manifestó su valor más alto de concentración entre las 13:00-16:00h en SM y SFE, aunque hay diferencias en su perfil. El máximo en SM representa más a ozono formado prácticamente dentro del mismo valle tanto por la hora de inicio de formación neta del O₃ como la hora del máximo entre las 13 y las 14 horas. Se considera que el periodo de formación neta corresponde a aquél en el que la reacción de titulación del ozono por NO $(O_3 + NO \rightarrow NO_2 + O_2)$ que domina toda la noche y por la mañana, es sobrepasada por la más rápida reacción de oxidación alterna del NO por radicales orgánicos y que favorece la acumulación del O₃:

 $NO + \cdot RO_2 \rightarrow NO_2 + \cdot RO_2$ $NO_2 + h\upsilon \rightarrow NO + O \cdot$ $O \cdot + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$

Asumiendo que el CO representa el mismo perfil del NO dado que ambos proceden de los mismos procesos de combustión, se puede aproximar que la producción neta de ozono en SM inicia entre 9 y 10 de la mañana en el punto donde se cruzan el perfil del CO que baja, con el del O₃ que va hacia arriba, para que se registre el máximo en unas 3.5 horas después. Por otro lado, en SFE, el inicio de la producción neta de ozono es hasta las 12 del día, para llegar al máximo unas 3.5 horas después. Claramente se observa que las mediciones corresponden al paso de parcelas de aire en proceso de envejecimiento. Destaca que, en el periodo de producción fotoquímica de ozono, se observa una ligera tendencia al incremento en las PM_{2.5}, y que una vez alcanzado el máximo de O₃, ambos muestran caída, lo que sugiere que las fuentes de emisión de ambas especies pudieron ser las mismas.

En tanto que en ININ, figura 4.7, se presentó un periodo máximo matutino de CO reflejando la influencia de emisiones frescas del entorno que se sumaron a las ya presentes

del CO remanente atrapado por arriba de la capa de inversión y que disminuye por efecto de la dilución conforme la capa de mezcla se desarrolla a la vez que las parcelas de aire son acarreadas por los vientos anabáticos, presentando un segundo incremento de menor magnitud entre las 15 y las 16 h que sigue la misma tendencia de las PM_{2.5} y del ozono. Por su mayor altitud, el paso de parcelas de aire con contaminantes está más retrasado y los contaminantes trazadores de emisiones generadas en los valles se encuentran mucho más diluidos con corrientes de aire en la altura y/o agotados por los procesos de reacción que ocurren durante su transporte. Después de este pico, el CO, las PM_{2.5} y el O₃ tienden a regresar a su nivel de fondo para mantenerse relativamente constantes en la noche, una vez que quedan atrapados por arriba de la capa de inversión nocturna en ambos valles.

Se puede decir que la producción de ozono en el ININ se observa a media mañana una vez que el desarrollo de la capa de mezcla rebasa el parte aguas de la sierra. Como en esta zona no hay emisiones de COVs ni NOx en la magnitud con la que se generan en los valles, el perfil de O₃ indica que los registros corresponden al paso de parcelas de aire parcialmente contaminadas conteniendo tanto especies todavía en reacción como de productos secundarios previamente formados, además de que se le suma el ozono preexistente en el sitio del remanente nocturno que queda por arriba de la capa de inversión. Por esta razón los valores máximos de O₃ no se presentan en horarios cercanos al medio día. La clara asociación entre los tres contaminantes (CO, PM_{2.5} y O₃) refleja el paso de masas de aire con un mismo origen que siguieron una trayectoria de paso por el ININ.

4.2.2.2 Comportamiento Semanal

Tal como se muestra en la Figura 4.9, los perfiles semanales de concentración de $PM_{2.5}$ son diferentes en cada uno de los tres sitios, habiendo mayor similitud en el comportamiento de ININ y SFE, lo que permite inferir que hay independencia entre SM y SFE e ININ.

Por el contrario, el ININ y SFE muestran claramente que la ocurrencia de estos niveles de $PM_{2.5}$ están ligados, en especial en el ININ, ya que es evidente que las masas de aire llegan a éste sitio con retraso de 2 a 3 horas y ya diluidas, siendo el mecanismo de formación y llegada de $PM_{2.5}$ en SFE el previamente explicado.



Figura 4.9. Perfil semanal de $PM_{2.5}$ para SM (rosa), ININ (verde) y SFE (azul) para 2017. Las líneas sólidas representan el promedio y las partes sombreadas indican el intervalo de confianza al 95% calculado con *openair*.

No se observa una tendencia clara en el comportamiento semanal en los sitios, aunque los lunes hay menores concentraciones del $PM_{2.5}$ en los 3 sitios. Curiosamente, los sábados los niveles de $PM_{2.5}$ en ININ son mayores al resto de la semana, lo cual podría ser atribuible a un incremento en el uso de leña en los comercios de comida relativamente cercanos al sitio de monitoreo que durante este día presentan una gran actividad, mientras que en SM el domingo se observa una mayor variabilidad al mediodía, quizás por la misma razón que en ININ. Al respecto el Informe Nacional de Calidad del Aire 2013 (INECC, 2014) menciona que, según los datos analizados no hubo un patrón definido para el comportamiento semanal, aunque coincide en que los domingos presentaron menores concentraciones, lo que fue atribuido a la disminución de las actividades por el fin de semana. Es posible ver este decremento también en ININ aun sin tener un entorno urbano, lo cual podría reforzar el planteamiento de la influencia de emisiones de las regiones vecinas.

4.2.2.3 Rosas de Viento

Las rosas de viento por estación para el periodo de la campaña de medición se muestran en la Figura 4.6. se consideraron vientos en calma a aquellos con velocidades menores o iguales a 0.4 m s⁻¹.



Figura 4.10. Comportamiento de dirección y velocidad del viento y para el periodo de CCA-PT17 para SM, ININ y SFE. Rosas de viento anual en la figura A2.2, en el anexo A2.

Para San Mateo Atenco (SM) las direcciones de viento dominantes fueron del SSE, S y SE, (Figura 4.10 (a)), las siguientes en orden de importancia fueron SSO, NE y NNE. En el sector sureste del sitio se encuentra el Área de Protección de Flora y Fauna "Ciénegas de Lerma" y el municipio de Tianguistengo, en dirección SO se ubica Metepec, mientras que al Noreste se localiza la zona industrial y el municipio de Lerma de Villada.

En ININ durante el periodo de campaña se observó que la dirección SE estuvo asociada con vientos de baja velocidad con mayor frecuencia. Los vientos provenientes del SSO y S mostraron vientos de intensidades variables alcanzando los 8.8 m s⁻¹, mientras que los sectores NNE y NE, presentaron un aporte menos significativo. Al noreste del ININ se ubican: el Parque Nacional La Marquesa y su conjunto ecoturístico; el nodo carretero donde concurren las carreteras 134 D,15 D y 15 que conectan la Ciudad de México con Toluca y recorren la región norte de la estación ININ y la carretera 6 hacia el municipio de Huixquilucan. En la región sur se encuentra un reducto boscoso y las localidades de Acazulco y Atlapulco (dirección SO). Cabe hacer notar que en las partes elevadas de la Sierra de las Cruces las corrientes de vientos anabáticos durante el periodo diurno y catabáticos durante la noche son dominantes, por lo que la rosa de vientos anual no permite observar estos dos efectos claramente. Estudios previos muestran que los vientos anábáticos provienen regularmente del NE-E, y los catabáticos del sector SE-S-SSO (Rosas-Pérez, I.;

et.al., 2006). Resulta notable que la frecuencia de vientos proveniente del área urbana de Toluca es muy baja comparada con las otras direcciones.

Finalmente, para SFE las direcciones con mayor peso fueron SO, N y NNO, con contribuciones menores del OSO, además de la presencia de vientos del NE con frecuencias muy pequeñas. La zona de SFE es una zona periurbana al poniente de la ZMVM. Hacia el oeste, norte y noroeste se encuentran parte de las alcaldías de Cuajimalpa e Hidalgo que son contiguas a los municipios de Huixquilucan y Naucalpan. Hacia el S y SO colindante con la zona de Santa Fe se localiza el Parque Nacional "Desierto de los Leones" y al NE, E y SE la Ciudad de México. Al igual que en ININ, una componente muy importante son los vientos catabáticos del SO.

4.3 ANÁLISIS DE TRAYECTORIAS DE RETROCESO

La generación de trayectorias de retroceso abarcó el periodo de 15 de febrero -14 de marzo del 2017 correspondiente a la duración de la campaña (CCA- PT17). Calculando las retro-trayectorias con GrADS, posteriormente acondicionando las bases de datos para ser procesadas en R y conformar representaciones geoespaciales de las trayectorias hacia atrás para cada sitio las cuales se muestran en las Figuras 4.11-4.13.

En las trayectorias que arribaron a SM (Figura 4.11) durante el periodo de CCA-PT17, se pueden diferenciar tres grupos, uno al norte con al menos cuatro retro-trayectorias iniciando en Tula y Tepeji, ambos en el estado de Hidalgo. Un segundo grupo hacia el NO, con diversos orígenes en la zona de Ixtlahuaca de Rayón, Jocotitlán, e incluso más orientadas al norte como Jilotepec, todos estos sitios en el Estado de México. Y un tercer grupo con predominancia del S-SE también con orígenes variados. Las trayectorias fueron consistentes con las direcciones del viento observadas durante el periodo de campaña (Figura 4.10 (a)). No se detectó la llegada de trayectorias directamente de la zona urbana de la CDMX.



Figura 4.11. Representación geoespacial de las trayectorias de retroceso de 8h de duración que arribaron al sitio de monitoreo SM, generadas con GrADS a partir de los máximos diarios del periodo de 15 de febrero-14 de marzo de 2017.

Para ININ, tal como se muestra en la Figura 4.12, se diferenciaron tres grupos principales, uno en el sector NE de la estación cuyas trayectorias incluyeron a las que se originaron en puntos de los municipios de Ecatepec, Actopan, Huehuetoca pasando por algunas zonas del pie de monte de la Sierra de las Cruces del lado de la Cuenca del Valle de México; y un segundo conjunto proveniente del suroeste, formado por dos subgrupos diferentes en las tendencias de inicio; el primero al SE, donde las trayectorias de las masas de aire parten de los municipios morelenses de Mazatepec, Miacatlán, Zacualpan y Cuernavaca y con menos trayectorias del grupo SO. En este caso la agrupación de las trayectorias fue mucho más clara que en SM. Así mismo, se aprecia claramente que independientemente de la cuenca de origen de las masas de aire, el paso de montaña de Salazar-Cuajimalpa fue efectivo para este desplazamiento de transporte.


Figura 4.12. Representación geoespacial de las trayectorias de retroceso de 8h de duración que arribaron al sitio de monitoreo ININ, generadas con GrADS a partir de los máximos diarios del periodo de 15 de febrero-14 de marzo de 2017.

Para el sitio SFE se observaron también 3 grupos (Figura 4.13), uno mayormente proveniente del norte con algunas trayectorias originadas cerca de Tepeji del Río y Huehuetoca, y otro con predominancia del arco NE-E (ZMVM), mismos que al avanzar aproximadamente a la altura del centro de la Ciudad de México se fusionaron en un solo grupo en el cual es difícil diferenciarlos. Por último, el conjunto del sector SO, con algunas trayectorias de parcelas de aire originadas dentro del estado de Morelos, otras del Estado de México del lado oeste y suroeste de la Sierra de las Cruces y algunas más que alcanzaron el estado de Guerrero. No se observaron parcelas con origen en la zona urbana de Toluca.



Figura 4.13. Representación geoespacial de las trayectorias de retroceso de 8h de duración que arribaron al sitio de monitoreo SFE, generadas con GrADS a partir de los máximos diarios del periodo de 15 de febrero-14 de marzo de 2017.

4.4 ANÁLISIS DE CLÚSTER

Aunque la inspección visual previa de retro-trayectorias individuales permitió conocer que había sólo algunos conglomerados distinguibles por cada sitio de monitoreo, no se tenía mayor detalle para la diferenciación y agrupación de las trayectorias. El uso del análisis de clúster permitió establecer un patrón de transporte más general asociado a una región específica, caracterizando el intercambio de masas de aire entre las cuencas atmosféricas de Toluca y Valle de México durante el periodo de la campaña CCA-PT17. Lo anterior fue posible al identificar, agrupar y diferenciar los conjuntos de retro-trayectorias a través de un método menos empírico que puede replicarse, pues establece una medida de diferenciación entre las trayectorias y grupos generados en cada sitio

Como paso inicial, se procedió a aplicar el proceso de clustering jerárquico por el método de Ward y continuando con clustering de particionamiento por *k*-medias, llevando a cabo un proceso de aglomeración de 2 etapas.

Producto de la primera etapa se generaron dendogramas para cada conjunto de pares de coordenadas de latitud y longitud de los puntos del recorrido de las retro-trayectorias los cuales se observan en las figuras 4.14-4.16 para los tres sitios.

El corte de cada dendograma se realizó tomando en cuenta dos parámetros:

- La similitud entre conglomerados (señalada en el eje vertical de cada gráfico) cuyo valor indica que tan parecidos son los conglomerados entre sí. Se considera que cuando este grado de similitud cambia de signo o presenta un cambio abrupto en las etapas de aglomeración, el proceso de clustering debe detenerse, pues los conglomerados presentes han dejado de ser lo suficientemente similares para unirse en uno solo.
- El número de grupos observados en las retro-trayectorias, previo a la aplicación del análisis de clúster, que se muestran en las figuras 4.11-4.13 y que resultaron ser 3 grupos para cada sitio.

Recordando que las rectas horizontales en los dendogramas de las figuras 4.14, 4.15 y 4.16 representan los clústeres, se ubicó el punto dónde el valor de similitud entre conglomerados tuvo su cambio más abrupto o bien un cambio de signo, que resultó ser en los tres casos el tercer paso del proceso de aglomeración, si se observa de arriba hacia abajo, tomando como primero al conglomerado único ubicado en la parte superior del gráfico que se separa del resto. En la figura se muestra el trazo de una recta en rojo paralela al eje de observaciones que indica donde se realizó el corte del dendograma o bien dónde se considera que debe detenerse el proceso de clustering.

En las tres estaciones se obtuvo la formación inicial de 4 conglomerados de observaciones de distinto tamaño, integrados por las observaciones inmediatas inferiores, que se

encuentran unidas a las rectas verticales que corta la línea roja, en las figuras 4.14 a 4.16 los cúmulos están enmarcados en naranja.

Como segundo paso, el número de clústeres obtenidos fue empleado como entrada para la realización del método de aglomeración de *k*-medias, en el cual también se esperaba tener cúmulos de tamaño diferente. En este método se empleó como parámetro de agrupación la distancia angular ya que la dirección de origen de las masas de aire que llegan al sitio son parte del objeto de estudio (Li et al., 2017).

Una vez que se finalizó el proceso de clustering con *k*-medias, cada una de las trayectorias de retroceso se asignó a un único conglomerado, resultando 4 clústeres distintos entre sí en cada sitio, además se generó una trayectoria promedio para cada grupo. A estas representaciones espaciales se les examinó tomando como representativa de cada cúmulo a la trayectoria media considerando forma y longitud características.



Pares de coordenadas de retro-trayectorias

Figura 4.14. Dendograma correspondiente a la aplicación del método de Ward a las coordenadas del recorrido de las trayectorias de retroceso con arribo al sitio SM. La línea roja marca el corte del dendograma para contabilizar los clústeres, mismos que se señalan dentro de un recuadro naranja.



Figura 4.15. Dendograma correspondiente a la aplicación del método de Ward a las coordenadas del recorrido de las trayectorias de retroceso con arribo al sitio ININ. La línea roja marca el corte del dendograma para contabilizar los clústeres, mismos que se señalan dentro de los recuadros naranjas.



Pares de coordenadas de retro-trayectorias

Figura 4.16. Dendograma correspondiente a la aplicación del método de Ward a las coordenadas del recorrido de las trayectorias de retroceso con arribo al sitio SFE. La línea roja marca el corte del dendograma para contabilizar los clústeres, mismos que se señalan dentro de los recuadros naranjas.

Tomando en cuenta la información anterior y con los datos de trayectorias combinados con las concentraciones máximas se realizaron pruebas estadísticas. Primero se aplicó la prueba de Kruskal-Wallis (K-W) para identificar la variación entre conglomerados (inter-clúster) de las concentraciones de $PM_{2.5}$ en cada sitio receptor, aquellos sitios donde el p-valor calculado para K-W fue menor que la significancia de la prueba, la probabilidad de que todos los clústeres provinieran de la misma población no fue significativa. Dicho de otra manera, la concentración asociada a la mediana de al menos un conglomerado fue diferente a la de los demás. Sin embargo, esta prueba no indica diferencia entre conglomerados individuales, por lo que para conocer los cúmulos distintos entre sí se procedió a aplicar de comparación por pares con el método de Dunn. Esta prueba arrojó como resultado que algunos clústeres no eran significativamente diferentes en sus concentraciones, indicando que podrían ser unidos en un mismo conglomerado sin embargo no fueron fusionados puesto que el comportamiento de su trayectoria media caracterizaba un patrón de transporte distinto entre ellos.

En aquellos conglomerados con diferencias significativas se entiende que fueron afectados por diversas fuentes de $PM_{2.5}$, de la misma manera que aquellos que no exhibieron diferencias significativas se asume fueron afectados por las emisiones de $PM_{2.5}$ de fuentes similares (Ghosh et al., 2015).

Abdalmogith y Harrison (2005) y Salvador et al. (2008) señalan el uso de pruebas estadísticas como un método que puede emplearse no sólo para reducir el número de clústeres y también para contrastar las fuentes u orígenes de las concentraciones que fueron agrupadas dentro de los conglomerados. Especialmente el uso de la prueba K-W en la que se pueden manejar también las siguientes hipótesis:

 H_0 = Las emisiones de PM_{2.5} provienen de fuentes locales, principalmente tráfico y otros procesos de combustión, y tienen una influencia más fuerte que el origen de las masas de aire.

 H_1 =Los niveles de $PM_{2.5}$ muestreados en el sitio están influenciados por el transporte de masas de aire que llegan al sitio y que están representadas por los clústeres (Salvador et al., 2008).

Tomando en cuenta este manejo alterno de los resultados de las pruebas de Kruskal-Wallis aplicadas con anterioridad a los tres sitios, donde se presentaron valores de p menores a la significancia estadística establecida (validando H₁), se puede decir que además de existir diferencias entre las concentraciones de PM_{2.5}, estas estuvieron relacionadas con los patrones de transporte observado a través de los clústeres. De la misma manera y usando los resultados de la prueba de Dunn se puede asumir que, los conglomerados sin diferencias significativas presentaron mayor influencia de contaminación de origen local que de origen regional.

Los conglomerados y los resultados obtenidos en estas pruebas se detallan en las secciones 4.4.1 a 4.4.3 destinados a los resultados del análisis de clúster de cada sitio.

En las figuras de 4.17 a 4.19 se muestran los mapas de las trayectorias promedio de los clústeres obtenidos para cada sitio al centro y las trayectorias que forman cada clúster a los lados, además de las gráficas de caja y bigote de PM_{2.5}, CO y O₃ generadas con datos de monitoreo asociados a los horarios en que se dieron los valores de mayor concentración de PM_{2.5} y que fueron usados para calcular las retro-trayectorias, se incluyen CO y O₃ pues en esta parte del análisis, como se había mencionado previamente, estos contaminantes pueden proporcionar una imagen más clara de las fuentes que impactan al sitio receptor.

De manera adicional con el fin de comprobar si los patrones de recirculación y transporte entre cuencas estaban relacionados con meteorología a escala sinóptica se obtuvieron mapas de superficie (NOAA, 2017) para cada día del periodo de CCA-PT17 y estos se relacionaron con los días que integraron cada cúmulo y se encuentran en el anexo A4.

4.4.1 San Mateo Atenco (SM)

En este sitio se identificaron 4 conglomerados (Figura 4.17). Las regiones de donde provinieron fueron mayormente: S-SE (C1), SO (C2), NO-NNO (C3) y N-NE (C4), en algunos hay mezcla de más de dos direcciones, especialmente en conglomerados heterogéneos. Sin embargo, se tomó en cuenta la trayectoria promedio de cada grupo para definir una dirección dominante. C1, C2 y C3 acumularon el 28.6% de las trayectorias calculadas cada uno y C4 con 14.3%, en todos los clústeres la concentración promedio (promedio de máximos) de PM_{2.5} fue mayor a 45 μ g m⁻³. Cada uno de los conglomerados además estuvo asociado a días por encima de la norma de calidad del aire de 24h para PM_{2.5}.

La retro-trayectoria promedio de C1, con el mismo porcentaje de trayectorias (28.6%) que C2, se originó en el flanco oeste de la Sierra de las Cruces en las inmediaciones del municipio de Ocoyoacac que ya forma parte de la ZMVT y posteriormente dentro del mismo valle se deformó en dirección suroeste y cruzó Tianguistengo, localidad que presenta un crecimiento poblacional e industrial importante, para después rodear el Volcán Holotepec al sur de Toluca y finalmente avanzar por el sur a través de la zona periurbana del sureste de Toluca para arribar a la zona de la estación SM por el sur.

Las concentraciones promedio en C1 fueron de 69 μ g m⁻³ de PM_{2.5}, con valores en el rango de 51 a 110 μ g m⁻³, ligeramente mayores a las mediciones en C2, y presentando 5 días que sobrepasaron el valor umbral de 24h de 45 μ g m⁻³. En cuanto a los contaminantes gaseosos, tanto el CO como el O₃ presentaron valores promedios mayores a C2 y C3, lo que podría ser interpretado como un posible transporte de masas de aire mezcladas con

emisiones frescas (dado el valor de CO) y envejecidas, tanto en el origen como durante la recirculación que presentaron las parcelas en este cúmulo.

El clúster C1 además de características de recirculación presentó un desplazamiento más lento en la zona sur del Valle de Toluca indicando transporte de contaminantes dentro de la misma cuenca, es decir mayor influencia local. Este clúster a escala sinóptica presentó predominancia de baja presión e influencia de algunos frentes fríos.

En cuanto a las trayectorias asociadas a las concentraciones promedio más bajas se agruparon en el clúster SO (C2), originado en la región de Luvianos, Almoloya de Alquisiras y Tenancingo. De acuerdo con la retro-trayectoria promedio de este clúster, las masas de aire inicialmente avanzaron rodeando el Nevado de Toluca para después adentrarse en el Valle de Toluca a través zonas forestales y agrícolas, y finalmente cruzar o recircular a través de la zona urbana de Toluca (trayectorias verdes en C2).

Si bien salvo situaciones extraordinarias como incendios o quemas agrícolas se podría asumir que, de manera cotidiana durante este periodo la acumulación inicial de $PM_{2.5}$ fue baja hasta antes de llegar a la ZMVT donde se incrementó hasta cruzar los municipios de Mexicaltzingo y parte de Metepec que cuentan con mayor desarrollo urbano. Así mismo este clúster presentó una rapidez de desplazamiento mayor a la que mostraron los clústeres 1 y 3, y baja presencia de recirculación en la cuenca.

La concentración promedio de $PM_{2.5}$ en C2 fue de 64 µg m⁻³, con un intervalo de concentraciones de 46 a 95 µg m⁻³, siendo relativamente menor a los otros clústeres de SM, pero aún superior a todos los promedios de los conglomerados de ININ y SFE; al tiempo que presentó concentraciones de CO menores a 1 ppm y O₃ por debajo del nivel de fondo.

Se puede decir que los máximos de PM_{2.5} asociados a C2 durante el tiempo de CCA-PT17 fueron menores en comparación con el resto de los clústeres del sitio, aunque estuvieron asociados a 4 días con concentraciones fuera de la norma, además, al realizar un análisis de la meteorología a escala sinóptica que se dio durante el periodo de campaña en el centro del país, obtenida a partir de mapas de análisis de superficie de Norte América (NOAA, 2017), y vincularla con los días cuyas trayectorias integraron este cúmulo mostró que en su mayoría estuvieron asociados a condiciones de alta presión.

Por su parte el valor promedio de las concentraciones del conglomerado C3 fue de 81 μ g m⁻³, además fue el conglomerado con mayor cantidad de días por encima de la NOM-025 de 24 h para PM_{2.5} (6 días), a pesar de tener la misma frecuencia de ocurrencia que C1 y C2. Surgió en las inmediaciones de Ixtlahuaca de Rayón que corresponde a la Zona de Atlacomulco, y lentamente se desplazó hacia el sur para atravesar la región industrial de Lerma de donde pudo recibir contaminantes frescos, que se sumaron a los colectados y arrastrados hasta la zona de SM. Lo anterior se infiere debido a que las concentraciones de CO y O₃ son bastante similares a las presentadas por C1 y al hecho de

que también presentó patrones de recirculación dentro de la cuenca del Valle de Toluca en el sector NO. Si bien las condiciones de presión a escala sinóptica fueron variadas, a lo largo de los días que integraron este conglomerado en su mayoría se presentaron altas presiones atmosféricas.

Finalmente, las concentraciones más altas se agruparon en el C4 con retro-trayectorias de dirección Norte-Noreste y valores de 59 a 160 μ g m⁻³ de PM_{2.5}. Este clúster incluyó trayectorias provenientes de la zona industrial de Tula y Tepeji, Hidalgo, recorriendo el municipio de Naucalpan por el lado oriental de la Sierra de las Cruces, para cruzar esta sierra a la altura del municipio de Huixquilucan, por el sur del Cerro La Campana.

Este clúster no exhibió recirculaciones, pero si el movimiento promedio más rápido de los 4 conglomerados, además de las concentraciones promedio de $PM_{2.5}$, CO más altas, pero de O_3 más bajas. El hecho de que las medianas de CO y $PM_{2.5}$ sean elevadas, mientras que la respectiva de O_3 haya sido tan baja indica que las masas de aire pasaron por áreas ricas en emisiones primarias que llevaron al registro "alto" de CO con los respectivos NOx asociados que a su vez titularon las ya bajas concentraciones de O_3 presentes. Esas áreas pudieron ser tanto la zona urbana circundante como las de tráfico vehicular de la carretera México-Toluca.

Hay que considerar que 8 horas antes del arribo de estas parcelas al sitio iniciaron su trayecto en las primeras horas de la madrugada dentro de la cuenca del Valle de México, si bien cruzaron la Sierra de las Cruces al amanecer, estas parcelas pudieron mantenerse todavía por encima de la capa de inversión presente en el Valle de Toluca, por lo que es posible que al romperse la capa de inversión a media mañana, parte de estos contaminantes primarios originados en el norte de la ZMCM fueran mezclados hacia abajo pudiendo llevar al incremento observado de CO y PM_{2.5} a esa hora a nivel superficie. Las condiciones sinópticas predominantes para las trayectorias asociadas a este clúster fueron de baja presión.

Aun cuando C4 fue el patrón menos predominante de los identificados para la estación SM y estuvo asociado a menor cantidad de eventos de $PM_{2.5}$ por encima de lo regulado (2 días), es claro que se dio por un paso de montaña ubicado en la Sierra de las Cruces.



4.4.2 Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ)

En la Figura 4.18 se muestran los resultados del análisis de clúster para la estación ININ que, aunque no mostró ningún día asociado a valores por arriba de la respectiva NOM para 24 horas, es de especial interés pues permite confirmar la posibilidad de este paso de montaña como uno de los puntos geográficos de intercambio de PM_{2.5} entre las Cuencas de los valles de Toluca y México.

Los sectores donde se originaron los conglomerados de retro-trayectorias que pasaron por ININ fueron: S (C1), SO (C2), NNE (C3) y O (C4). El primero con 33% del total de trayectorias del sitio, C2 con 19%, C3 agrupó el 37% del total y finalmente C4 presentó solo el 11%; de ellos únicamente C3 presentó valores máximos horarios por encima del valor de 45 μ g m⁻³, el resto se mantuvo con un promedio alrededor de los 30 μ g m⁻³ de PM_{2.5} debiéndose recordar que la hora habitual de los máximos fue por la tarde en ligera asociación con el pico de O₃ y con el segundo máximo promedio de CO.

El clúster 1 de parcelas de aire agrupó las concentraciones de $PM_{2.5}$ más bajas, con un promedio de 18 µg m⁻³, y tuvo su origen al suroeste de la Zona Metropolitana de Cuernavaca, desde donde se dirigió al ININ por la parte del suroeste del flanco poniente de la Sierra de las Cruces en el Estado de México, para adentrarse en la Zona Metropolitana de Tianguistengo y finalmente pasar por la zona de monitoreo por el norte del Cerro San Miguel y sin interactuar directamente con la ZMVT. Si bien los valores promedios identificados de PM_{2.5} y CO fueron los más bajos del sitio, la concentración promedio de O₃ fue de 57 ppb, aunque presentó "outliers" con valores relativamente altos, dada la hora del registro promedio de las partículas que prácticamente coinciden con el máximo de ozono y un semi-pico de CO, es posible inferir que tuvieron un mismo origen y que la mayor parte de ellas fueron aerosoles secundarios. Esto implica que las masas de aire que se agruparon en este clúster presentaban una baja concentración inicial de CO y $PM_{2.5}$ como contaminantes primarios y cierto grado de envejecimiento dados los valores de O₃, cuyos precursores fueron emitidos al SO del Valle de Cuernavaca y se transformaron en el trayecto generando O₃, PM_{2.5} secundaria. Para C1 los sistemas meteorológicos asociados fueron mayoritariamente presiones bajas.

El clúster promedio 2 tuvo su origen en la región SO del Nevado de Toluca, para seguir en ruta por Villa Guerrero y Tenancingo, y enseguida ingresar al Valle de Toluca por el oeste del volcán Holotepec cerca de Tenango del Valle. Para finalmente arribar al ININ por el paso de San Pedro Atlapulco, al igual que C1. El paso por Holotepec ya había sido identificado como punto geográfico potencial de intercambio de contaminantes entre el Valle de Cuernavaca con el Valle de Toluca (UNAM & INECC, 2016). La meteorología sinóptica asociada a este conglomerado fue predominantemente de presiones bajas.

La concentración promedio en este clúster fue 22 μ g m⁻³ de PM_{2.5}, con un mínimo de 11 y un máximo de 33 μ g m⁻³, en cuanto a los gases se repitió el patrón observado en C1 de concentraciones bajas de CO y relativamente altas de O₃, siendo cercano al promedio observado en C1 (C2 con 53 ppb y C1 con 57 ppb de O₃), es posible que el ozono y parte de las PM_{2.5} observadas en este conglomerado hayan sido colectadas en las comunidades por las cuales cruzaron las parcelas de aire y se hayan sumado a las concentraciones de fondo tanto de ozono como aerosoles que quedan atrapados por encima de la capa de inversión, misma que al romperse permite el mezclado con contaminantes en la superficie. Esto se refuerza observando la concentración de CO cuyo promedio se encuentra por encima de la concentración de fondo.

Por su parte, el cúmulo de parcelas de aire C3 con origen al NNE de ININ, mostró las mayores concentraciones de $PM_{2.5}$ en las retro-trayectorias que lo integraron, con un promedio de 33 µg m⁻³, además de que fue el único conglomerado asociado al ININ que incluyó una trayectoria con más de 45 µg m⁻³. También presentó los valores más altos registrados en el sitio para CO y O₃, siendo el patrón de transporte más frecuente en el sitio durante los máximos de PM_{2.5} en el periodo de CCA-PT17.

El recorrido promedio realizado por C3 inició por la mañana en el Norte de la Zona Metropolitana del Valle de México cerca de la región de Tepeji - Huehuetoca - Tula, en su trayecto hacia el punto de monitoreo pasa sobre zonas como Cuautitlán, Tlalnepantla, Naucalpan y Huixquilucan en el Estado de México y la zona oeste de la Ciudad de México, para posteriormente alcanzar al ININ al cruzar la región montañosa de la Sierra de las Cruces por el paso de montaña de Salazar. El desplazamiento del promedio de las retro-trayectorias del clúster fue rápido y sin muchas perturbaciones y se encontró asociado a condiciones atmosféricas sinópticas mixtas, pues se presentaron altas y bajas presiones, estas últimas con ligera dominancia.

La ruta promedio del conglomerado C3 explica porque las concentraciones más altas se asociaron a este, pues su paso por zonas urbanas e industriales con grandes emisiones de precursores justifica la observación de una concentración promedio de 72 ppb de O_3 , con valores por arriba del percentil 75 cercanos a 100 ppb. Además, presentó la concentración promedio más alta de CO de todos los conglomerados que pasaron por ININ, lo que confirma el origen urbano de las parcelas de aire que lo integraron.

Finalmente, el C4 fue el clúster que presentó la menor distancia recorrida, con ello el desplazamiento más lento y una menor cantidad de trayectorias presentes en relación con los clústeres de este sitio, el 11% del total. Este cúmulo se originó en el sector oeste de la estación interactuando con Valle de Toluca y la zona industrial de Lerma, y presentando en al menos una de las trayectorias que lo integran un patrón de recirculación, para finalmente alcanzar al ININ por el flanco oeste a través del paso de montaña usado por la Carretera México-Toluca del lado contrario a la población de Salazar.

Las concentraciones promedio encontradas en este clúster fueron de 21 μ g m⁻³ de PM_{2.5}, y los valores promedio más bajos de CO y O₃ en comparación con los otros conglomerados, su origen en la zona oriental de la Ciudad de Toluca con actividad vehicular intensa implica que las masas de aire involucradas en este conglomerado pudieron colectar emisiones frescas de contaminantes que se transformaron durante la recirculación, así mismo la presencia del O₃ con valores promedio apenas por encima 40 ppb pudieron deberse a que las emisiones matutinas de NOx titularon el ozono presente en las parcelas de aire pero sin llegar a reducirlo más allá del nivel de fondo. Lo anterior se comprobó con las pruebas estadísticas que arrojaron un p-valor para C4 mayor a la significancia de la prueba, es decir, se considera que el aporte local predomina sobre el origen de la masa de aire, aunque el término "local" en este caso se refiere al alcance de la contaminación.

En conclusión, a través de ININ pasan parcelas de aire fotoquímicamente envejecidas que acarrean altas concentraciones de contaminantes secundarios y de CO como trazador de las emisiones urbanas. El paso usado por C3 ya había sido identificado por Chuquer-Sola (2014) como un sitio potencial para el transporte de PM₁₀.

A través del análisis realizado fue posible observar que ININ si recibió masas de aire que interactuaron con la cuenca del Valle de México, la cuenca del Valle de Toluca e incluso con la posibilidad de algunas contribuciones al poniente del Valle Cuautla-Cuernavaca durante el periodo de duración de CCA-PT17 y en los periodos de máximas concentraciones que fueron sobre los que se basa este estudio. Se pudo observar que 3 de los 4 clústeres calculados interactuaron con el Valle de Toluca (C1, C2, C4) y únicamente C3 lo hace con la cuenca del Valle de México, sin embargo, es justo esta última la que provee de mayores niveles de PM_{2.5}, O₃ y CO y lo hace más frecuentemente que los otros grupos.

Se presentaron en todos los conglomerados, excepto en C4, eventos de concentraciones promedio mayores a 70 ppb de O₃, lo cual se asoció con el transporte de parcelas en proceso de envejecimiento desde los sitios de origen de las masas de aire y con el horario a partir del cual estas trayectorias fueron calculadas, pues 80% del total de ellas estuvieron ligadas a horarios vespertinos entre las 18:00 y 21:00 h UTC, es decir entre 12:00 y 15:00 locales que es el periodo en que se produce el máximo de O₃ por reacciones fotoquímicas y éste es transportado lejos de la zona de emisión de precursores.



4.4.3 Santa Fe (SFE)

La estación Santa Fe se encuentra dentro de la cuenca del Valle de México, y tal y como se observa en la Figura 4.19, se identificaron dos clústeres de trayectorias con desarrollo dentro de esta cuenca (C1 y C3) y dos que se originaron en el exterior (C2 y C4).

Los sectores promedio en los que se agruparon las trayectorias fueron NE (C1), SSO (C2), ESE (C3) y NNE (C4). C1 y C2 presentaron el 25% de trayectorias cada uno, C3 el 14% y C4 resultó ser el de mayor tamaño con 36% del total de trayectorias. En 3 de los 4 conglomerados fue posible ver al menos una trayectoria con concentraciones de $PM_{2.5}$ mayores a 45 µg m⁻³ con paso por SFE.

En cuanto a C1, salvo una trayectoria que tuvo origen en el pie de monte de la Sierra de las Cruces del lado del Valle de Toluca, el resto de las trayectorias se originaron al norte de la Ciudad de México, entre Ecatepec y el ex lago de Texcoco, posteriormente recorrieron la zona de Netzahualcóyotl y cruzaron la zona urbana de las alcaldías Gustavo A. Madero, Cuauhtémoc y Benito Juárez de la Ciudad de México y llegando a la estación por el NE. En todo el trayecto se presentó interacción con regiones densamente pobladas y con actividad económica importante, y en consecuencia con aportes constantes de contaminantes. El clúster se desenvolvió con una rapidez moderada dentro de la cuenca, pero sin presentar recirculación, dominando un comportamiento meteorológico sinóptico de bajas presiones.

La concentración promedio de $PM_{2.5}$ que caracterizó a este clúster fue de 33 µg m⁻³, con un intervalo de 21 a 57 µg m⁻³, concentración ligeramente menor que en C4. Considerando que el valor promedio de CO fue de 0.3 ppm apenas menor al de todos los conglomerados en SFE, pero con el segundo más alto de O₃ con 70 ppb, se pudo tratar de transporte de parcelas envejecidas desde la región norte o bien cargadas en precursores que se transformaron y enriquecieron en la ruta hacia SFE.

El clúster C2 se originó fuera de la cuenca en la región periurbana del poniente del Estado de Morelos, y el suroeste del Estado de México. En general las masas de aire siguieron un recorrido hacia el NNE por el lado sur-sur poniente del pie de monte de la Sierra de la Cruces-Zempoala del lado del Estado de México para finalmente alcanzar la zona de Santa Fe cruzando la Sierra de las Cruces por la zona circundante al Parque Nacional La Marquesa (al norte del Cerro San Miguel) y por Acopilco en el Estado de México, región que recorre la carretera México-Toluca, estas masas de aire cruzaron poblaciones pequeñas y terrenos agropecuarios paralelos al flanco oeste de la Sierra de las Cruces sin interactuar con la zona urbana de Toluca, mostrando un desplazamiento relativamente más rápido comparado con los cúmulos C1 y C3, además de estar asociado a bajas presiones a nivel sinóptico.

Las trayectorias que integraron C2 fueron 25% del total del sitio con concentración promedio de 26 µg m⁻³ y valor máximo de 47 µg m⁻³. En cuanto a los contaminantes gaseosos, los valores de O₃ presentaron un promedio apenas por encima de 50 ppb, mientras que las concentraciones de CO, aunque fueron similares en los cuatro grupos (0.4 ppm) fueron individualmente más dispersas. Los valores promedio de $PM_{2.5}$ y O_3 aun cuando no son los más altos para SFE son para tomarse en cuenta puesto que este clúster no atraviesa zonas de alta densidad poblacional o zonas industriales adicionales a la porción del Valle de México antes de arribar a la estación. Posiblemente hubo cierto enriquecimiento de partículas finas vehiculares del tráfico carretero a lo largo de la trayectoria general y contribuciones de emisiones de quema de biomasa, ya sea para uso doméstico o de actividades agrícolas. El hecho de que el promedio de ozono registrado en la hora vespertina del paso de las parcelas de aire por SFE sea bajo, ligeramente mayor al de referencia como concentración de fondo de 40 ppb, indica que estas parcelas de aire no recogieron emisiones importantes de precursores que pudieran transformarse en su recorrido. La trayectoria promedio inicia en la zona de Iztapalapa al oriente de la zona urbana, para dirigirse al sur por la zona de Coyoacán-Tlalpan y entonces desplazarse en dirección NNO.

El Clúster 3, representativo de trayectorias con desarrollo en la región E-SE con respecto a SFE, contó con menor cantidad de trayectorias, 14%, se originó en el interior del Valle de México con trayectorias menos compactas que mostraron un patrón de recirculación dentro del valle y fueron relativamente más cortas y lentas.

C3 presentó la concentración promedio de $PM_{2.5}$ más baja del sitio con 23.5µg m⁻³ y ninguna trayectoria con valores mayores a 33 µg m⁻³, también resultó como la menor media de O₃ (~ 42 ppb) de los 4 clústeres pero ligeramente mayor en el promedio de CO asociada (~0.40 ppm), lo que puede hablar de emisiones frescas que fueron transportadas desde el oriente de la zona urbana de la cuenca en la zona de Netzahualcóyotl, a través de Iztapalapa, para desplazarse hacia el SO en dirección de Coyoacán- Tlalpan, para entonces ascender por la ladera oriente de la Sierra de las Cruces por la alcaldía Álvaro Obregón y seguir hacia SFE. A lo largo de la ruta, parcelas de aire recogen emisiones de tráfico vehicular las cuales son intensas por la mañana llevando a la producción fisicoquímica tanto de ozono como de aerosoles. No obstante, es posible que en el camino de ascenso hacían SFE ocurran procesos de remoción de ozono y poco enriquecimiento de partículas, dado que a toda la zona sur-suroeste de la CDMX es urbana con tráfico vehicular pesado a diésel bajo y sin industrias. La meteorología sinóptica dominante en la ocurrencia de este clúster fue la baja presión.

Las pruebas de hipótesis aplicadas a los conglomerados en este sitio arrojaron un valor de p mayor a la significancia de la prueba en C3 sugiriendo que este clúster representa aporte local y en menor medida transporte de PM_{2.5} de mayor alcance. Finalmente, C4, que provino de la región norte-noreste de la Ciudad de México fue el que presentó mayor cantidad de trayectorias, mostrando que los máximos de PM_{2.5} identificados en SFE durante el periodo de CCA-PT17 estuvieron en un 36% relacionados con este patrón de transporte. En general tuvo un comportamiento bastante similar al C3 de ININ, pues fue también una trayectoria que se movió de manera relativamente más rápida que los otros clústeres en esta ubicación, teniendo su origen en Huehuetoca y en la zona industrial de Tula- Tepeji, para posteriormente cruzar Cuautitlán y bordear el parque estatal de la Sierra de Guadalupe por su lado oeste y así seguir su recorrido a través de Tlalnepantla, Cuautitlán Izcalli y Naucalpan en el Estado de México, interactuando con zonas industriales y urbanas con tráfico vehicular pesado, por lo cual el que haya presentado las concentraciones más altas de PM_{2.5} y O₃ (medianas: 39 µg m⁻³ y 83 ppb, respectivamente) fue congruente con el recorrido que exhibió la travectoria promedio del clúster. Es claro entonces que estas zonas representaron un aporte importante y constante a la contaminación del Valle de México durante el periodo en el que se realizó la campaña CCA-PT17. Al igual que en el caso de C3 del ININ, las trayectorias para C4 ocurrieron bajo condiciones sinópticas mixtas de altas y bajas presiones.

Se puede decir que el transporte de $PM_{2.5}$ a través de las elevaciones del poniente de la cuenca del Valle de México es bajo, y solo en la ocurrencia de transporte de masas de aire similares a C2 a través del paso de montaña cercano a la población de Salazar, cuando se dieron constantes intercambios con la región de Toluca, aunque estos no presentaron carga de contaminantes con la magnitud y frecuencia equiparable a los originados en la región de Huehuetoca (C4). En cuanto a los patrones de recirculación dentro del valle únicamente se identificó un clúster (C3) durante el periodo.

Queda claro que las concentraciones promedio resultantes de $PM_{2.5}$, CO y O₃ pudieron estar influenciadas por el horario en el que se dieron los máximos que originaron las trayectorias, si bien en SM e ININ se ha manifestado en un horario predominante, en SFE los horarios fueron más heterogéneos con el 50% de las retro- trayectorias dentro del horario de 12 a 17:00 hora local, asociado a actividad fotoquímica, mientras que otro 26% se dio en horarios matutinos de 8-10:00 hora local, pudiendo estar relacionado con los horarios de tráfico vehicular. En la Tabla 4.3 se presenta un resumen de la estadística calculada para cada sitio y sus conglomerados en referencia a $PM_{2.5}$



Tabla 4.3 Resumen de estadísticas de los clústeres generados por sitio durante el periodo de CCA-PT17 para PM2.5										
Clúster	Sector	Trayectorias		Media (µg m ⁻³)	Desviación Estándar	Mínimo (µg m ⁻³)	Mediana (µg m ⁻³)	Máximo (µg m ⁻³)	Días >45 μg m ⁻³	Condiciones sinópticas prodominantos
		Número	% del total	1	(µg m)					preuominuntes
SM										
C1	(SE)	8	28.6	69.0	20.1	51.0	60.0	110.0	5	Baja presión y frentes fríos
C2	(SO)	8	28.6	64.0	17.2	46.0	57.0	95.0	4	Alta presión
C3	(NNO	8	28.6	81.0	27.4	33.0	82.0	123.0	6	Alta presión
C4	(N)	4	14.0	93.0	41.4	59.0	77.0	160.0	2	Baja Presión
	ININ									
C1	(S)	9	33.3	18.0	4.6	10.0	18.0	27.0	0	Baja presión
C2	(SO)	5	19.0	22.0	9.5	11.0	20.0	33.0	0	Baja presión
C3	(NNE)	10	37.0	33.0	9.2	21.0	32.0	53.0	0	Mixto
C4	(0)	3	11.0	22.0	4.6	17.0	18.0	27.0	0	Alta presión
SFE										
C1	(NE)	7	25.0	33.0	11.3	21.0	29.0	57.0	0	Baja presión
C2	(SSO)	7	25.0	26.0	10.8	16.0	23.0	47.0	0	Baja Presión
C3	(E)	3	14.0	24.0	6.6	17.0	22.0	33.0	0	Baja Presión
C4	(NNE)	10	36.0	38.0	5.9	27.0	37.0	49.0	0	Mixto

Vale la pena recalcar que los resultados fueron obtenidos y promediados a partir de máximos horarios de PM_{2.5} durante el mes de duración de la campaña CCA-PT17 por lo cual los perfiles horarios de los contaminantes son de vital importancia para comprender el comportamiento de las retro-trayectorias que integraron los conglomerados.

A modo de resumen se remarcan los siguientes puntos:

- En general se observó que los valores de PM_{2.5} y CO más altos registrados de los tres sitios se dieron en SM, así como los más bajos de O₃, pudiendo significar que este sitio durante los periodos de máxima concentración de PM_{2.5} fue impactado más por emisiones locales, al tiempo que recibe masas de aire con contaminantes frescos o que aún no han sido del todo transformados.
- Se identificaron conglomerados donde los valores de O₃ eran los más altos del grupo en contraparte con PM_{2.5} y CO, lo cual podría ser atribuido a lo siguiente: la presencia de parcelas de aire envejecidas que llegaron e interactuaron con emisiones frescas del sitio o sus alrededores, asumiendo la presencia de PM_{2.5} secundaria dentro de las parcelas de aire que iniciaron su trayecto con gran cantidad de precursores en su mayoría de O₃ y por lo cual al llegar al sitio ya habían consumido el CO que contenían y además de estar asociadas con el horario de máxima generación de ozono que coincide en el perfil horario de las ubicaciones con el mínimo de CO.
- En los tres sitios se presentaron patrones de recirculación dentro de las cuencas atmosféricas de interés, en ININ y SM dentro del Valle de Toluca y en SFE en el Valle de México en ninguno de los casos las concentraciones de PM_{2.5} relacionadas a dichos clústeres (SM-C1, SM-C3, ININ-C4 y SFE-C3) fueron las mayores del conjunto, pero para el caso de SM fueron los conglomerados asociados a ellos lo que estuvieron relacionados con mayor cantidad de días por encima de la norma de 24h de PM_{2.5}.
- Las condiciones meteorológicas de alta o baja presión se relacionaron en los patrones de recirculación de la siguiente manera; los conglomerados con orígenes y movimiento en la zona oeste estuvieron relacionados con altas presiones, mientras que los que se movieron desde el este se relacionaron con bajas presiones.
- El intercambio entre las cuencas del Valle de México y Toluca puede ocurrir en ambos sentidos a través de la Sierra de las Cruces y se da principalmente sobre los pasos de montaña que se encuentran al sur de los Cerros La Campana y

Salazar y al norte del Cerro San Miguel lo cual concuerda con lo encontrado por Chuquer-Sola para PM_{10} .

- La influencia del sector norte dominado por la zona industrial de Tula-Tepeji, Huehuetoca y Tlalnepantla y la zona conurbada de estos municipios, incluyendo Tultitlan y Cuautitlán quedó demostrada en los tres sitios con los clústeres de mayor concentración de PM_{2.5} asociada (SM-C4, ININ-C3 y SFE-C4), cuyas masas de aire se desplazaron más rápido y sin recirculación. Los clústeres correspondientes a la llegada de masas de aire a SM e ININ provenientes de la Cuenca del Valle de México coincidieron con la entrada de estas masas por la Sierra de las Cruces, mientras que SFE recibió masa de aire provenientes del Estado de México, pero con frecuencia reducida. En este sentido se observó también que los patrones con origen norte además fueron los más abundantes en SFE e ININ con 37 y 36% del total de trayectorias para cada sitio. Si bien las condiciones de presión sinóptica identificadas para cada cúmulo no mostraron una clara tendencia, este comportamiento se pudo relacionar más con sistemas de baja presión
- Los horarios en que se identificaron los máximos y que se presentaron en mayor 0 cantidad están fuertemente relacionados con el comportamiento diario de los contaminantes en los diferentes sitios. Por ejemplo, los horarios predominantes de los máximos de $PM_{2.5}$ en SM fueron matutinos (6-11:00 hora local), presentaron más del 50% de las trayectorias asociadas a procesos de recirculación y un bajo porcentaje a masas de aire de la región norte. En ININ y SFE las concentraciones máximas mostraron predominancia hacia después del medio día, lo que indica que en su mayoría consistieron en masas de aire parcialmente envejecidas acarreadas por las parcelas de aire de un sitio relativamente lejano pero sin tendencia a la recirculación dentro de las cuencas y una mayor asociación con el transporte de masas de aire desde la zona norte. Dichas situaciones son reforzadas por el hecho de que por la mañana hay una gran acumulación de contaminantes por debajo de la capa de inversión pero una vez que esta se rompe, el transporte regional de vientos hacia el sur-suroeste de la cuenca del Valle de México en su mayor parte como viento anabáticos hacia elevaciones de la Sierra de las Cruces y en particular a través de los pasos de montaña hacia afuera de la cuenca es favorecido, de tal forma que por la tarde ya que la capa de inversión se ha desplazado hacia mayores alturas facilita el intercambio.

CONCLUSIONES

- Ninguna de las 3 estaciones de monitoreo cumplió con la NOM-025-SSA1-2014 anual para PM_{2.5} para el año 2017.
- Los patrones horarios en SFE y SM están relacionados con actividades humanas en las inmediaciones y/o viento abajo, mientras que en ININ responden más a transporte desde otras regiones debido al entorno rural de la estación.
- Dados los horarios a partir de los cuales fueron calculadas las retro-trayectorias, los patrones de transporte mostrados por los conglomerados y sus concentraciones presentaron una fuerte relación con el perfil diario de PM_{2.5} en cada sitio.
- Los conglomerados que interactuaron con el Valle de Toluca y se adentraron al Valle de México lo hicieron por la Sierra de las Cruces, a través de los pasos de Salazar, el sur del cerro La Campana, el norte del Cerro San Miguel, coincidiendo con los identificados por Chuquer (2014).
- Los clústeres originados en la zona de Tula-Tepeji y Huehuetoca fueron asociados a las más altas concentraciones de PM_{2.5} en cada sitio, además de ser los que recorrieron Valle de México y entraron al Valle de Toluca por el paso de la Sierra de las Cruces ubicado entre el Cerro la Campana y la población de Salazar. Las estaciones más afectadas fueron ININ y SFE.
- Se presentaron conglomerados de recirculación dentro de las cuencas de Toluca y de México, con concentraciones de PM_{2.5} de bajas a moderadas en comparación con las presentadas por el esquema de transporte desde la zona norte de ambas cuencas. Estos patrones de recirculación fueron más frecuentes en la ZMVT durante horarios matutinos, lo cual pudo ser respuesta de la baja altura de la capa de mezcla, mientras que los patrones de transporte de alcance regional se dieron mayoritariamente en horarios vespertinos donde la capa de mezcla se encuentra en su máximo tamaño.
- Durante CCA-PT17 se presentó trasporte de contaminantes entre la Cuenca del Valle de México, Cuenca del Valle de Toluca y Cuenca de Cuernavaca-Cuautla, sugiriendo un intercambio constante y activo entre estas cuencas confirmando estudios previos.

ANEXOS

ANEXO A1. LIMPIEZA, VERIFICACIÓN Y VALIDACIÓN DE DATOS

Para los datos de contaminantes se realizaron los siguientes procedimientos

- \circ PM_{2.5} y PM₁₀, se muestra resumen del proceso en la Figura A.1.1
 - Se colocaron los datos en forma de series de tiempo, identificando datos nulos (descritos por el valor -9999) que fueron invalidados.
 - Se identificaron valores por debajo del límite inferior de datos negativos, el valor asignado fue $<-4.0 \ \mu g \ m^{-3} \ y$ fueron anulados.
 - Se marcaron con la bandera IO (Inválido por operador) los datos que se repetían más de 3 horas consecutivas
 - Se determinaron los valores localizados en el intervalo [-4, 0], y se sustituyeron con el valor de 2.0 μ g m⁻³ que corresponde al 50% del límite de detección del analizador FH 64 C14.
 - Se revisaron datos extremos y aberrantes. A aquellos que estaban fuera de tendencia se asignó la bandera de IO y donde los datos extremos eran congruentes se señaló la bandera de VE (VE= Válido con Evento Extraordinario), los datos con bandera IO se consideraron inválidos.

La congruencia de los Eventos Extraordinarios se explica si en los datos inmediatos están presentes datos inválidos o ausencia de ellos lo que implicaría una falla del equipo o del suministro eléctrico.

- Se verificó la relación ($PM_{2.5}/PM_{10}$)>1.15, en aquellos donde no se cumplió se colocó IO.
- Se realizó una segunda limpieza eliminando los datos con bandera de IO.
- Se realizó una lag-plot "y vs y+1" para $PM_{2.5}$ y PM_{10} y se evaluaron manualmente los datos extremos que no tuvieran banderas asignadas.
- \circ CO
- Se corrigieron desplazamientos en la línea base en caso de encontrarse
- Se identificaron los valores <-1.0 ppm y fueron invalidados
- Se señalaron con bandera IO los datos que se repetían por más de 3 horas

- Los datos dentro del intervalo [-1,0], fueron sustituidos por el valor de 0.02 ppm correspondiente al 50% del límite de detección del analizador TEI 48C
- Se revisaron datos extremos y aberrantes. A aquellos que estaban fuera de tendencia se asignó la bandera de IO y donde los datos extremos eran congruentes se señaló la bandera de VE, los datos con bandera IO se consideraron inválidos.
- Se realizó una lag-plot "y vs y+1" y se evaluaron manualmente los datos extremos que no tuvieran banderas asignadas.

 \circ O_3

- Se identificaron los valores <-1.0 ppb y fueron invalidados
- Se señalaron con bandera IO los datos constantes por más de 3 horas
- Los datos dentro del intervalo [-1,0], fueron sustituidos por el valor de 0.02ppm correspondiente al 50% del límite de detección del analizador TEI 49C
- Se revisaron datos extremos y aberrantes. A aquellos que estaban fuera de tendencia se asignó la bandera de IO y donde los datos extremos eran congruentes se señaló la bandera de VE, los datos con bandera IO se consideraron inválidos.
- Se realizó una lag-plot "y vs y+1" y se evaluaron manualmente los datos extremos que no tuvieran banderas asignadas.
- Velocidad y Dirección del Viento

Para estos parámetros se emplearon las directrices que sugieren Estevez y colaboradores (Estévez, J.; Gavilán, P.; Giráldez, 2011) para la validación de datos meteorológicos obtenidos por estaciones automáticas, el diagrama de flujo se muestra en la Figura A.1.2., la modificación que se incluye en este trabajo es considerar valores horarios en lugar de semi horarios.

- Prueba de rango: 0<Velocidad del Viento<60.3
- Prueba de paso: $|VV_h VV_{h+1}| < 10$
- Prueba de consistencia interna: VV=0 entonces DV=0, si, VV≠0, DV≠0
- Prueba de persistencia: $VV_{h} \neq VV_{h+1} \neq VV_{h+2} \neq VV_{h+3}$



Figura A1.1 Proceso de limpieza, validación y verificación de datos de $PM_{2.5}$ y PM_{10}



Figura A1.2 Proceso de limpieza, validación y verificación de datos de velocidad y dirección de viento.

ANEXO A2. ESTADÍSTICA BÁSICA, SERIES DE TIEMPO ANUALES DE PM10 Y ROSAS DE VIENTO ANUALES

Estadística básica de $PM_{2.5}$, PM_{10} , O_3 y CO para el periodo anual y de CCA-PT17 La cantidad de datos horarios esperados para el periodo anual de 2017 fue de 8760.

Tabla A2.1 Estadística descriptiva de parámetros horarios medidos									
por estación de monitoreo durante 2017									
Sitio	N	Min	Media	Max	Q1	Q2	Q3	RIC	DS
				PM _{2.5} (µg m ⁻³)				
SM	8332	2.00	43.1	299.0	28.0	39.0	54.0	26.0	21.5
SFE	7689	1.0	20.3	104.0	11.0	18.0	27.0	16.0	12.5
ININ	6203	1.0	14.4	81.0	7.0	13.0	20.0	13.0	9.4
PM ₁₀ (µg m ⁻³)									
SM	8212	8.0	75.9	653.0	44.0	66.0	97.0	53.0	47.2
SFE	7689	2.0	36.9	187.0	22.0	33.0	49.0	27.0	20.3
ININ	6208	1.0	23.3	147.0	11.0	20.0	31.0	20.0	15.4
CO (ppm)									
SM	8465	0.0	0.6	3.9	0.3	0.5	0.9	0.6	0.4
SFE	3456	0.1	0.2	0.8	0.1	0.2	0.5	0.4	0.1
ININ	4017	0.1	0.3	1.6	0.1	0.2	0.4	0.3	0.2
O ₃ (ppb)									
SM	8169	2.0	25.3	106.0	7.0	20.0	35.8	28.8	18.1
SFE	6660	1.0	39.1	139.0	34.0	35.0	53.0	19.0	21.4
ININ	6762	1.0	30.4	158.0	15.0	23.0	47.0	32.0	25.5
VELOCIDAD DEL VIENTO (m s ⁻¹)									
SM	8468	0.3	1.4	5.8	0.7	1.7	1.9	1.2	0.9
SFE	8620	0.2	2.4	7.6	1.7	2.2	2.8	1.1	1.0
ININ	7614	0.0	1.9	7.4	1.0	1.7	2.7	1.6	1.2

estación durante CCA-PT17									
Sitio	Ν	Min	Media	Max	Q1	Q2	Q3	RIC	DS
PM _{2.5} (µg m ⁻³)									
SM	654	15.0	45.3	160.0	32.3	42.0	53.8	21.5	18.9
SFE	643	2.0	15.2	60.0	9.0	14.0	20.0	11.0	9.1
ININ	623	2.0	19.3	66.0	11.0	17.0	25.0	14.0	10.9
	PM ₁₀ (µg m ⁻³)								
SM	655	653.0	16.0	91.3	66.7	56.0	75.0	107.0	51.0
SFE	645	82.0	3.0	26.9	16.1	15.0	23.0	35.0	20.0
ININ	645	108.0	5.0	39.2	18.7	26.0	36.0	50.0	24.0
CO (ppm)									
SM	658	0.0	0.4	2.6	0.2	0.4	0.6	0.5	0.4
SFE	335	0.1	0.2	0.6	0.1	0.1	0.2	0.1	0.1
ININ	157	0.1	0.3	0.9	0.1	0.2	0.3	0.2	0.1
O ₃ (ppb)									
SM	680	4.0	18.6	77.0	7.0	15.0	27.0	20.0	12.9
SFE	618	1.0	45.0	115.0	33.3	42.0	55.0	21.8	18.3
ININ	653	1.0	37.8	147.0	19.0	30.0	49.0	30.0	27.0
VELOCIDAD DEL VIENTO (m s ⁻¹)									
SM	645	0.4	1.6	5.4	0.8	1.4	2.2	1.4	1.0
SFE	639	0.02	2.1	7.1	1.1	1.9	2.8	1.7	1.2
ININ	671	0.4	2.5	6.9	1.7	2.4	3.0	1.3	1.1

Tabla A2.2 Estadística descriptiva de parámetros horarios medidos por estación durante CCA-PT17



Series de tiempo anuales del año 2017 de PM₁₀ para los tres sitios de monitoreo.

Figura A2.1 Series de tiempo de promedios horarios PM_{10} para el año 2017 en las estaciones SM (a), ININ (b) y SFE (c), la zona enmarcada en amarillo muestra el periodo de la campaña de monitoreo CCA-PT17.



Figura A2.2 Rosas de viento anuales por estación de monitoreo, se incluyen los porcentajes de calmas consideradas a partir de 0.4 ms^{-1} .

ANEXO A3. METEOROLOGÍA SINÓPTICA

En esta sección se muestran los mapas de análisis de superficie de las 18:00 UTC (12:00 hora local) de Norte América para el periodo de CCA-PT17 (figura A3.1), así como la tabla A3.1 donde se condensan las fechas y horas donde se identificaron los máximos de PM_{2.5} usados para calcular las retro-trayectorias y su asociación a cada uno de los conglomerados que las incluyen.



Figura A3.1 Mapas de Analísis de Superficie de las 18:00 UTC (12:00 hora local) de Norte América para el periodo de CCA-PT17.









Tabla A3.1 Fechas de máximos de PM2.5 por sitio en UTC y su pertenencia a los diferentes conglomerados, marcado en azul se encuentran los días que estuvieron asociados a promedios de 24 h fuera de la NOM-025-SSA1-2014 para PM2.5.

SAN MATEO (SM)								
C1	C2	C3	C4					
15/02/2017 17:00	17/02/2017 05:00	19/02/2017 13:00	01/03/2017 12:00					
23/02/2017 17:00	20/02/2017 20:00	21/02/2017 17:00	02/03/2017 13:00					
25/02/2017 17:00	21/02/2017 13:00	22/02/2017 15:00	08/03/2017 14:00					
26/02/2017 10:00	25/02/2017 04:00	24/02/2017 07:00	10/03/2017 14:00					
06/03/2017 10:00	05/03/2017 10:00	27/02/2017 16:00						
07/03/2017 13:00	07/03/2017 03:00	28/02/2017 17:00						
11/03/2017 13:00	09/03/2017 13:00	03/03/2017 16:00						
13/03/2017 15:00	12/03/2017 15:00	05/03/2017 03:00						
INSTITUTO NACIONAL DE INVESTIGACIONES NUCLEARES (ININ)								
C1	C2	C3	C4					
15/02/2017 21:00	17/02/2017 08:00	21/02/2017 19:00	04/03/2017 18:00					
16/02/2017 19:00	18/02/2017 18:00	27/02/2017 19:00	07/03/2017 16:00					
19/02/2017 20:00	24/02/2017 23:00	01/03/2017 22:00	09/03/2017 20:00					
20/02/2017 20:00	25/02/2017 19:00	02/03/2017 21:00						
22/02/2017 23:00	13/03/2017 06:00	03/03/2017 21:00						
23/02/2017 20:00		05/03/2017 20:00						
27/02/2017 03:00		06/03/2017 20:00						
28/02/2017 22:00		08/03/2017 20:00						
11/03/2017 14:00		10/03/2017 21:00						
		12/03/2017 14:00						
	SANTA	FE (SFE)						
C1	C2	C3	C4					
15/02/2017 18:00	16/02/2017 15:00	18/02/2017 17:00	21/02/2017 22:00					
24/02/2017 20:00	17/02/2017 14:00	07/03/2017 22:00	22/02/2017 22:00					
26/02/2017 16:00	19/02/2017 20:00	12/03/2017 07:00	01/03/2017 21:00					
28/02/2017 23:00	20/02/2017 23:00	13/03/2017 14:00	02/03/2017 20:00					
06/03/2017 22:00	23/02/2017 17:00		03/03/2017 22:00					
09/03/2017 18:00	26/02/2017 00:00		04/03/2017 16:00					
13/03/2017 02:00	28/02/2017 01:00		05/03/2017 15:00					
			08/03/2017 20:00					
			10/03/2017 19:00					
			11/03/2017 16:00					
ANEXO A4. GENERALIDADES DE CÁLCULO CON GRADS

Grid Analysis and Display System (GrADS) es una herramienta que se utiliza para la manipulación y la visualización de datos de Ciencias de la Tierra. GrADS tiene una interfaz programable (lenguaje de scripting) que permite aplicaciones sofisticadas de análisis y visualización (Vargas-Calderon, 2018).

La selección de GrADS para este trabajo responde a la operatividad que presenta este software para la representación y uso de datos meteorológicos generados por el modelo regional WRF, archivos tipo NetCDF, con resolución de 3 km. Con esta resolución se permite mejorar el modelado de las trayectorias ya que el dominio de estudio es reducido y una resolución mayor podría generar trayectorias menos representativas. Así mismo, su uso también permite modelar la cantidad de trayectorias requeridas en minutos, evitando la generación manual de trayectorias una a una con la aplicación en línea de HYSPLIT reduciendo los potenciales problemas de error humano en la introducción de datos.

Los datos del modelo WRF que se manipulan con GRADS son discretizados en una malla, asignando a cada celda un valor promedio. La resolución horizontal está relacionada con el espaciamiento entre las celdas de la malla, a mayor resolución del modelo se pueden reproducir fenómenos a una escala menor, una resolución alta en modelos regionales de mesoescala (1 a 30 km) mejora las capacidades de representación del terreno lo que influye sobre el cálculo de la meteorología (Vargas-Calderon, 2018).

El script para el cálculo de trayectorias, "HORIZONTAL FORWARD AND BACKWARD TRAJECTORIES" (traj.gs), permite generar trayectorias horizontales de avance y retroceso (backward y forward) y fue desarrollado en el 2001 por el Dr. Bernat Codina de la Universidad de Barcelona (Codina, 2001).

El cálculo de trayectorias de retroceso se lleva a cabo a partir de ecuaciones elementales cinemáticas donde supone que la aceleración de la masa de aire permanece constante durante los intervalos de tiempo Δt y toma un sistema de referencia cartesiano (esquema mostrado).



Figura A4.1 Esquema general del movimiento de una partícula simulado por GRADS para generar la trayectoria de retroceso.

Considere una masa de aire ubicada en el punto P₀ en el momento t_0 (Figura A4.1). Siempre que se conozca el campo de viento en ese momento, el viento que sopla en P₀, la posición de esta parcela de aire en un tiempo precedente Δt se podría asumir como P₁ asumiendo que \vec{v}_0 permanece sin cambio durante dicho intervalo. Ahora suponiendo que se conoce el campo de viento en el tiempo $t_1 = t_0 - \Delta t$. El procedimiento se repite para P₁ y se puede encontrar la partícula viajando en \vec{v}_1 para llegar P₂ en el tiempo $t_2 = t_1 - \Delta t$. La repetición de este procedimiento generará la trayectoria durante el tiempo determinado.

Asumiendo que el campo de viento se conoce en cada intervalo de tiempo, la exactitud de este cálculo dependerá de la duración del intervalo Δt : en intervalos más cortos la hipótesis de un campo de viento constante es razonable y proporciona mejores estimaciones.

El desarrollo matemático del modelado de trayectorias de retroceso y avance usado como base para la elaboración de traj.gs puede consultarse en el trabajo de Codina (1992)

En el diagrama de flujo mostrado en la Figura A4.2 se muestra el proceso que realiza el script traj.gs empleado en este trabajo.



Figura A4.2. Diagrama de flujo de la obtención de trayectorias que realiza el script traj.gs

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abdalmogith, S. S., & Harrison, R. M. (2005). The use of trajectory cluster analysis to examine the long-range transport of secondary inorganic aerosol in the UK. *Atmospheric Environment*, 39(35), 6686–6695. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.07.059
- Adachi, K. (2008). Nanoparticles in the Atmosphere. *Elements*, *4*, 389–394. https://doi.org/10.2113/gselements.4.6.389
- Barrera-Huertas, H. A., Torres Jardón, R., Ruíz Suárez, L. G., García Yee, J. S., Torres Jaramillo, A., Martínez Bolívar, A. P., Gutiérrez López, W., García, L. M., de los Reyes, E., Robles, M., Retama Hernandez, A., & García Reynoso, J. A. (2019). Analysis of ozone transport in the atmospheric basin of Puebla-Tlaxcala in central Mexico. *Revista Internacional de Contaminacion Ambiental*, *35*(4), 869–888. https://doi.org/10.20937/RICA.2019.35.04.08
- Bartnicki, J. (1994). An Eulerian model for atmospheric transport of heavy metals over Europe: Model description and preliminary results. *Water, Air, & Soil Pollution*, 75(3–4), 227–263. https://doi.org/10.1007/BF00482939
- Boian, C., Fátiam, E. M. D. E., & André, S. (2012). CHARACTERIZATION OF OZONE TRANSPORT AMONG METROPOLITAN REGIONS. 27(2), 229–242.
- Burley, J. D., Theiss, S., Bytnerowicz, A., Gertler, A., Schilling, S., & Zielinska, B. (2015). Surface ozone in the Lake Tahoe Basin. *Atmospheric Environment*. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.02.001
- Carslaw, D. (2015). The openair manual- open-source tools for analysing air pollution data. Manual for version1.1-4.
- Chuquer-Sola, D. (2014). Transporte de contaminantes atmosféricos entre la Zona Metropolitana del Valle de México y la Zona Metropolitana del Valle de Toluca. UNAM.
- Codina, B. (1992). *Contribució a l'estudi del rentat de l'atmosfera per la pluja*. Universitat de Barcelona.
- Codina, B. (2001). HORIZONTAL FORWARD AND BACKWARD TRAJECTORIES (traj. gs).
- COLA. (2015). Grid Analysis and Display System (GrADS). http://cola.gmu.edu/grads/
- Consejo Estatal de Población. (2021). *Población por Municipio*. COESPO. coespo.edomex.gob.mx/información_municipal
- Cuevas-Contreras, J. A. (2014). Correlación entre ácido nítrico gaseoso y ozono en un sitio receptor de smog fotoquímico de la Ciudad de México. UNAM.
- De Foy, B., Krotkov, N. A., Bei, N., Herndon, S. C., Huey, L. G., Martínez, A. P., Ruiz-Suárez, L. G., Wood, E. C., Zavala, M., & Molina, L. T. (2009). Hit from both sides: Tracking industrial and volcanic plumes in Mexico City with surface measurements and OMI SO2 retrievals during the MILAGRO field campaign. *Atmospheric Chemistry and Physics*. https://doi.org/10.5194/acp-9-9599-2009

De Foy, B., Varela, J. R., Molina, L. T., & Molina, M. J. (2006). Rapid ventilation of the Mexico

City basin and regional fate of the urban plume. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6(8), 2321–2335. https://doi.org/10.5194/acp-6-2321-2006

- Estévez, J.; Gavilán, P.; Giráldez, J. V. (2011). Guidelines on validation procedures for meteorological data from automatic weather stations. *Journal of Hydrology*, 402(1–2), 144–154. https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2011.02.031
- Fleming, Z. L., Monks, P. S., & Manning, A. J. (2012). Review: Untangling the influence of airmass history in interpreting observed atmospheric composition. *Atmospheric Research*, 104–105, 1–39. https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2011.09.009
- García-Escalante, J. S., García-Reynoso, J. A., Jazcilevich-Diamant, A., & Ruiz-Suárez, L. G. (2014). The influence of the Tula, hidalgo complex on the air quality of the Mexico city metropolitan area. *Atmosfera*. https://doi.org/10.1016/S0187-6236(14)71111-7
- García-Palomo, A., Zamorano, J. J., López-Miguel, C., Galván-García, A., Carlos-Valerio, V., Ortega, R., & Macías, J. L. (2008). El arreglo morfoestructural de la Sierra de Las Cruces, México central. *Revista Mexicana de Ciencias Geologicas*, 25(1), 158–178.
- García-Reynoso, A., Jazcilevich, A., Ruiz-Suárez, L. G., Torres-Jardón, R., Suárez Lastra, M., & Reséndiz juárez, N. A. (2009). Ozone weekend effect analysis in México City. *Atmosfera*.
- García-Yee, J. S., Torres-Jardón, R., Barrera-Huertas, H., Castro, T., Peralta, O., García, M., Gutiérrez, W., Robles, M., Torres-Jaramillo, J. A., Ortínez-Álvarez, A., & Ruiz-Suárez, L. G. (2018). Characterization of NOx-Ox relationships during daytime interchange of air masses over a mountain pass in the Mexico City megalopolis. *Atmospheric Environment*. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.11.017
- Garzón, J. P., Huertas, J. I., Magaña, M., Huertas, M. E., Cárdenas, B., Watanabe, T., Maeda, T., Wakamatsu, S., & Blanco, S. (2015). Volatile organic compounds in the atmosphere of Mexico City. *Atmospheric Environment*. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.08.014
- GEM. (2007a). *Cuencas atmosféricas del Estado de México*. 40. http://sma.edomex.gob.mx/sites/sma.edomex.gob.mx/files/files/sma_pdf_2007_ca_em.pdf
- GEM. (2007b). Norma Técnica Estatal Ambiental NTEA-007-SMA-DS-2006. http://legislacion.edomex.gob.mx/sites/legislacion.edomex.gob.mx/files/files/pdf/gct/2007/ mar051.pdf
- GEM. (2018). Programa de Gestión para Mejorar la Calidad del Aire en el Estado de México. ProAire 2018 - 2030.
 http://proaire.edomex.gob.mx/sites/proaire.edomex.gob.mx/files/files/mis pdf/ProAire 2018-2030.pdf%0Ahttp://proaire.edomex.gob.mx/proaire_edomex
- Ghosh, S., Biswas, J., Guttikunda, S., Roychowdhury, S., & Nayak, M. (2015). An investigation of potential regional and local source regions affecting fine particulate matter concentrations in Delhi, India. *Journal of the Air and Waste Management Association*, 65(2), 218–231. https://doi.org/10.1080/10962247.2014.982772
- Govender, P., & Sivakumar, V. (2020). Application of k-means and hierarchical clustering techniques for analysis of air pollution: A review (1980–2019). *Atmospheric Pollution Research*, *11*(1), 40–56. https://doi.org/10.1016/j.apr.2019.09.009

- Hamer, P. D., Walker, S. E., Sousa-Santos, G., Vogt, M., Vo-Thanh, D., Lopez-Aparicio, S., Schneider, P., Ramacher, M. O. P., & Karl, M. (2020). The urban dispersion model EPISODE v10.0 - Part 1: An Eulerian and sub-grid-scale air quality model and its application in Nordic winter conditions. *Geoscientific Model Development*, 13(9), 4323– 4353. https://doi.org/10.5194/gmd-13-4323-2020
- INE-SEMARNAT. (2006). Guía metodológica para la estimación de emisiones de PM2.5.
- INECC. (2010). *Manual 5. Protocolo de Manejo de Datos de la Calidad del Aire*. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático.
- INECC. (2014). *Informe Nacional de la Calidad del Aire 2013, México*. Coordinacion General de Contaminación y Salud Ambiental.
- INECC. (2017). Informe Nacional de la Calidad del Aire 2016, México. Coordinación General de Contaminación y Salud Ambiental, Dirección de Investigación Sobre La Calidad Del Aire y Los Contaminantes Climáticos., 52(5000), 1–185. https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/236724/Informe_nacional_calidad_del_a ire_2015_Final.pdf
- INECC. (2018). Informe Nacional de Calidad del Aire 2017, México (Vol. 52, Issue 55).
- INECC. (2019). Informe Nacional de Calidad del Aire 2018, México.
- INEGI. (2019). Cuencas económicas y ecológicas de México 2018.
- INEGI. (2020). *Población rural y urbana*. http://cuentame.inegi.org.mx/poblacion/rur_urb.aspx?tema=P
- Jaimes-Palomera, M., Retama, A., Elias-Castro, G., Neria-Hernández, A., Rivera-Hernández, O., & Velasco, E. (2016). Non-methane hydrocarbons in the atmosphere of Mexico City: Results of the 2012 ozone-season campaign. *Atmospheric Environment*. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.02.047
- Jiménez, J. C., Raga, G. B., Baumgardner, D., Castro, T., Rosas, I., Báez, A., & Morton, O. (2004). On the composition of airborne particles influenced by emissions of the volcano Popocatépetl in Mexico. *Natural Hazards*. https://doi.org/10.1023/B:NHAZ.0000020254.46521.f9
- Kang, C., Gold, D., & Koutrakis, P. (2014). Downwind O3 and PM2.5 speciation during the wild fires in 2002 and 2010. *Atmospheric Environment*, 95, 511–519. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.07.008
- Kulshrestha, U., & Kumar, B. (2014). Airmass trajectories and long range transport of pollutants: Review of wet deposition scenario in South Asia. Advances in Meteorology, 2014, 14. https://doi.org/10.1155/2016/8167903
- Li, D., Liu, J., Zhang, J., Gui, H., Du, P., Yu, T., Wang, J., Lu, Y., Liu, W., & Cheng, Y. (2017). Identification of long-range transport pathways and potential sources of PM2.5 and PM10 in Beijing from 2014 to 2015. *Journal of Environmental Sciences (China)*, 56, 214–229. https://doi.org/10.1016/j.jes.2016.06.035
- Ma, J., Lin, W. L., Zheng, X. D., Xu, X. B., Li, Z., & L Yang, L. (2014). Influence of air mass downward transport on the variability of surface ozone at Xianggelila Regional

Atmosphere Background Station, southwest China. *Atmospheric Chemistry and Physics*. https://doi.org/10.5194/acp-14-5311-2014

- Magaña, V., & Caetano, E. (2007). Identificación de Cuencas Atmosféricas en México. In Instituto Nacional de Ecología. http://www.inecc.gob.mx/descargas/calaire/2007_inf_cuencas.pdf
- Mao, H., & Talbot, R. (2004). O3 and CO in New England: Temporal variations and relationships. *Journal of Geophysical Research D: Atmospheres*, *109*(21), 1–19. https://doi.org/10.1029/2004JD004913
- Martínez-Cinco, M., Santos-Guzmán, J., & Mejía-Velázquez, G. (2016). Source apportionment of PM2.5 for supporting control strategies in the Monterrey Metropolitan Area, Mexico. *Journal of the Air and Waste Management Association*, 66(6), 631–642. https://doi.org/10.1080/10962247.2016.1159259
- Martínez Vázquez, F. (2017). Analísis cuantitativo de la contaminación atmosférica de la ZMVT, 2011-2016, una visión prospectiva. Universidad Autónoma del Estado de México.
- Mijic, Z., Stojic, A., Perisic, M., Rajic, S., & Tasic, M. (2012). Statistical Character and Transport Pathways of Atmospheric Aerosols in Belgrade. *Air Quality - New Perspective*. https://doi.org/10.5772/45873
- Molina, L. T., Madronich, S., Gaffney, J. S., Apel, E., De Foy, B., Fast, J., Ferrare, R., Herndon, S., Jimenez, J. L., Lamb, B., Osornio-Vargas, A. R., Russell, P., Schauer, J. J., Stevens, P. S., Volkamer, R., & Zavala, M. (2010). An overview of the MILAGRO 2006 Campaign: Mexico City emissions and their transport and transformation. *Atmospheric Chemistry and Physics*, *10*(18), 8797–8760. https://doi.org/10.5194/acp-10-8697-2010
- Mugica, V., Ortiz, E., Molina, L., De Vizcaya-Ruiz, A., Nebot, A., Quintana, R., Aguilar, J., & Alcántara, E. (2009). PM composition and source reconciliation in Mexico City. *Atmospheric Environment*, 43(32), 5068–5074. https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.06.051
- NOAA. (2017). WPC's Surface Analysis Archive. https://www.wpc.ncep.noaa.gov/archives/web_pages/sfc/sfc_archive.php
- OCDE. (2015). Estudios Territoriales de la OCDE Valle de México, México. In OECD Territorial Reviews: Valle de México, Mexico. https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1787/9789264245174-en.
- Pandis, S. (2004). Atmospheric aerosol processes. In *Particulate Matter Science for Policy* Makers -- A NARSTO Assessment --.
- Pérez, I. A., Artuso, F., Mahmud, M., Kulshrestha, U., Sánchez, M. L., & García, M. Á. (2015). Applications of air mass trajectories. *Advances in Meteorology*, 2015, 20. https://doi.org/10.1155/2015/284213
- Poissant, L. (1999). Potential sources of atmospheric total gaseous mercury in the St. Lawrence River Valley. *Atmospheric Environment*. https://doi.org/10.1016/S1352-2310(98)00207-6
- Rosas-Pérez, I.;Ruiz-Suárez, L.G.; Grutter de la Mora, M.; García-Reynoso, A.; Jazcilevich Diamant, A.; Torres-Jardón, R.; Laguna-Hernández, G.; Corona-Nava, E.V.; Báez-Pedrajo,

A.; Hernández-Solís, J.M.; Escalante-González, J.; Gutiérrez-López, W.; Torr, X. (2006). *Calidad del Aire y la Relación Ciudad-Bosque. Informe Final, proyecto: SEMARNAT-CONACYT C01-0881/A1.*

- Salcedo, D., Castro, T., Ruiz-Suárez, L. G., García-Reynoso, A., Torres-Jardón, R., Torres-Jaramillo, A., Mar-Morales, B. E., Salcido, A., Celada, A. T., Carreón-Sierra, S., Martínez, A. P., Fentanes-Arriaga, O. A., Deustúa, E., Ramos-Villegas, R., Retama-Hernández, A., Saavedra, M. I., & Suárez-Lastra, M. (2012). Study of the regional air quality south of mexico city (morelos state). *Science of the Total Environment*. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2011.09.041
- Salvador, P., Artíñano, B., Querol, X., & Alastuey, A. (2008). A combined analysis of backward trajectories and aerosol chemistry to characterise long-range transport episodes of particulate matter: The Madrid air basin, a case study. *Science of the Total Environment*, 390(2–3), 495–506. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2007.10.052
- Schuenemeyer, J. H., & Drew, L. J. (2010). Statistics for Earth and Environmental Scientists. In *Statistics for Earth and Environmental Scientists*. https://doi.org/10.1002/9780470650707
- Secretaria de Desarrollo Urbano y Metropolitano. (2018). *Plan Municipal de Desarrollo Urbano y Metropolitano*.
- Secretaria del Medio Ambiente. (2005). *Informe climatológico ambiental del Valle de México* 2005. Gobierno del Distrito Federal. http://www.sma.df.gob.mx/sma/download/archivos/informeclimatologico/informeclimatol ogico.pdf
- Secretaria del Medio Ambiente. (2008). *Inventario de Emisiones de contaminantes criterio de la Zona Metropolitana del Valle de México 2006* (Gobierno del Distrito Federal (ed.)).
- Secretaria del Medio Ambiente. (2012). *Programa para Mejorar la Calidad del Aire del Valle de Toluca (2012-2017)*. Gobierno del Estado de México.
- SEDEMA. (2018a). *Informe Anual de Calidad del aire 2017*. http://www.aire.cdmx.gob.mx/descargas/publicaciones/flippingbook/informe_anual_calida d_aire_2017/mobile/#p=6
- SEDEMA. (2018b). Inventario de Emisiones de la Ciudad de México 2016.
- SEDEMA. (2019). *Estaciones de monitoreo*. http://www.aire.cdmx.gob.mx/entornos/entorno_detalle.php?est=hHh1
- Seinfeld, J. H., & Pandis, S. N. (1998). Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change. In *Jhon Wiley & Sons*. Jhon Wiley & Sons. https://doi.org/10.1063/1.882420
- SEMARNAT. (2017). Programa de Gestión Federal para Mejorar la Calidad del Aire de la Megalópolis. ProAire de la Megalópolis 2017-2030. SEMARNAT.
- SEMARNAT. (2019). Inventario Nacional de Emisiones de Contaminantes Criterio (INEM). https://www.gob.mx/semarnat/acciones-y-programas/inventario-nacional-de-emisiones-decontaminantes-criterio-inem
- Stohl, A. (1998). Computation, accuracy and applications of trajectories A review and

bibliography. Atmospheric Environment, 32(6), 947–966. https://doi.org/10.1016/S1352-2310(97)00457-3

- Sun, J., Huang, L., Liao, H., Li, J., & Hu, J. (2017). Impacts of Regional Transport on Particulate Matter Pollution in China: a Review of Methods and Results. *Current Pollution Reports*, 3(3), 182–191. https://doi.org/10.1007/s40726-017-0065-5
- Tufféry, S. (2011). Data Mining and Statistics for Decision Making. In Data Mining and Statistics for Decision Making. https://doi.org/10.1002/9780470979174
- UNAM, & INECC. (2016). Diagnóstico sobre la calidad del aire en cuencas atmosféricas de México. https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/208883/Informe_Final_AECAME_2016 1230.pdf
- US-EPA. (2002). Guidance on Environmental, Data Verification and Data Validation. EPA/240/R-02/004.
- Vargas-Calderon, L. M. (2018). Aceleración de un modelo numérico de predicción del tiempo para aplicaciones en alerta temprana a emergencias ambientales [Universidad Nacional de Córdoba]. https://rdu.unc.edu.ar/bitstream/handle/11086/11383/VargasCalderon_biblioteca_digital.pd f
- Vega, E., Eidels, S., Ruiz, H., López-Veneroni, D., Sosa, G., Gonzalez, E., Gasca, J., Mora, V., Reyes, E., Sánchez-Reyna, G., Villaseñor, R., Chow, J. C., Watson, J. G., & Edgerton, S. A. (2010). Particulate air pollution in Mexico city: A detailed view. *Aerosol and Air Quality Research*, 10(3), 193–211. https://doi.org/10.4209/aaqr.2009.06.0042
- Whiteman, C. D., Zhong, S., Bian, X., Fast, J. D., & Doran, J. C. (2000). Boundary layer evolution and regional-scale diurnal circulations over the Mexico Basin and Mexican plateau. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*. https://doi.org/10.1029/2000JD900039
- WHO. (2006). *Health risks of particulate matter from long-range transboundary air pollution*. WHO.
- WHO. (2018). Exposure to ambient air pollution from particulate matter for 2016. World Health Organization, April, 6. www.who.int/airpollution/data.%0Ahttps://www.who.int/airpollution/data/AAP_exposure_ Apr2018_final.pdf?ua=1
- Yang, W., Wang, G., & Bi, C. (2017). Analysis of long-range transport effects on PM2.5 during a short severe haze in Beijing, China. *Aerosol and Air Quality Research*, 17(6), 1510– 1522. https://doi.org/10.4209/aaqr.2016.06.0220