



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA
CENTRO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA

“DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DEL SISTEMA DE PRONÓSTICO DE CALIDAD DEL AIRE EN EL CENTRO DE MÉXICO”

TESIS

**QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS DE LA TIERRA**

PRESENTA:

JOSÉ ALEJANDRO RODRÍGUEZ ZAS

TUTOR:

DR. JOSÉ AGUSTÍN GARCÍA REYNOSO,
(CENTRO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA, UNAM)

COMITÉ TUTOR:

DR. ARON JAZCILEVICH DIAMANT
(CENTRO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA, UNAM)

DR. ERNESTO DOS SANTOS CAETANO NETO
(INSTITUTO DE GEOGRAFÍA, UNAM)

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX.
MAYO, 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.

DEDICATORIA

A Dios:

*mi guía, quien me enseñó a ver la vida desde otro punto de vista,
a reír y a ser feliz, me permitió llegar hasta aquí, vivo y fuerte*

A mis hijas Emma y Elisa:

*mi razón de ser, el ritmo de mis latidos, mis grandes y verdaderos amores,
mis amuletos, mi gran pasión, mi vida toda*

A mis padres Vivian y José:

la luz de mi vida, artífices de mis conquistas, mis héroes, mi molde

A mi esposa Evelyn:

mi amiga, mi compañera, mi eterno amor, mi confidente, mi ángel de la guarda

A mi familia toda:

el regalo más grande, mi fuerza, mi energía, mi objetivo siempre

A la vida:

el más preciado tesoro del ser humano

A mí mismo, a Alejandro:

*el eterno compañero, la voz interior, la conciencia,
el que siempre confía en mí, el que no me abandona nunca*

AGRADECIMIENTOS

A mis padres, mis hijas, mi esposa, mis hermanos, mi familia toda... por guiar mis pasos, amarme y protegerme, moldearme y comprender mis caprichos, soportar mi carácter, salvarme de situaciones difíciles, ser los hombros en los que siempre me apoyo, nunca dejarme solo y andar junto a mí en este largo camino que es la vida. A Dios, mi guía.

A la familia Savón-García, por recibirme en México el primer día y hacerme parte de ellos

A mi tutor Dr. José Agustín García Reynoso por orientarme en esta difícil tarea y siempre brindarme su ayuda incondicional, confiar en mí y ser mi amigo. Mi respeto y admiración.

Al Dr. Ernesto Dos Santos Caetano Neto y al Dr. Aron Jazcilevich Diamant por su ayuda en la realización de esta investigación, en la evaluación y revisión, el consejo oportuno.

Al Dr. Ricardo Torres Jardón por su amistad siempre, revisar esta tesis y sus consejos.

Al Dr. Oscar Peralta Rosales, al Dr. Cuauhtémoc Turrent y al Dr. José Noel Carbajal Pérez por aceptar la revisión de esta tesis y sus valiosos aportes a la misma.

Al MSc. Orlando Delgado Delgado por ayudarme a dar el primer paso en esta experiencia

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico otorgado para realizar mis estudios de doctorado. Al Posgrado en Ciencias de la Tierra y al Centro de Ciencias de la Atmósfera por permitirme vivir la experiencia investigativa y usar el clúster Ometeotl. A Araceli Chamán por su ayuda incondicional siempre.

Al Laboratorio Nacional de Cómputo de Alto Desempeño (LANCAD) y a la Dirección de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) por el tiempo y recursos computacionales otorgados en la supercomputadora Miztli.

Al Fondo Especial de Ingresos Extraordinarios y su Beca de Apoyo para Titulación y Obtención de Grado. Al Programa de Apoyo a los Estudios de Posgrado (PAEP) de la UNAM por el apoyo económico brindado para la participación en eventos científicos.

A todos mis amigos, los que están y los que ya no. A Cuba y a México. A Swing Completo.

RESUMEN

La gestión de la calidad del aire ha adquirido gran relevancia en México, dadas las afectaciones que provoca la contaminación ambiental en las zonas metropolitanas más importantes del país. Sin embargo, muchas medidas afines se toman una vez declaradas las contingencias ambientales y cuando la población ya se vio afectada.

En el presente trabajo se desarrolló y evaluó un sistema de pronóstico de calidad del aire para el Centro de México a partir del modelo fotoquímico Weather Research and Forecasting with Chemistry (WRF-Chem). Primeramente, se definió su configuración para ejecutarse de forma operativa y, luego, se aplicó el modelo de distribución espacial, temporal y de especiación química (DiETE) al Inventario Nacional de Emisiones de México de 2013 para obtener una base de datos desagregada espacial y temporalmente, lista para la modelación numérica con WRF-Chem en el área de estudio.

Se evaluó el desempeño del sistema en un episodio de contingencia ambiental por ozono ocurrido del 15 al 21 de mayo de 2017, comparando sus salidas con observaciones de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico de la Ciudad de México. Las métricas estadísticas mostraron baja correlación entre el modelo y las mediciones y se decidió actualizar el inventario empleado, mediante una metodología no paramétrica de factores de escalamiento. Esto permitió obtener una mejor correlación, con valores del modelo que sí describían el comportamiento espacial y temporal de las variables. Los ajustes al inventario se validaron mediante su aplicación a otro caso de contingencia ambiental ocurrido del 14 al 17 de marzo de 2016, resultando en un buen desempeño del modelo.

Posteriormente, se evaluaron los resultados del pronóstico operativo de la calidad del aire para los años 2018 y 2019, a través de estadísticos como el Índice de Concordancia de Willmott y herramientas del Model Evaluation Tools versión 5.1. Se obtuvo un mejor desempeño del modelo para el año 2019, en variables meteorológicas y químicas.

Este estudio contribuye a la creación de nuevas capacidades y herramientas para el pronóstico de calidad del aire para el Centro de México y el producto obtenido se encuentra disponible y ejecutándose de forma operativa.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE FIGURAS	II
ÍNDICE DE TABLAS	IV
INTRODUCCIÓN.....	1
CAPÍTULO 1: FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA Y ANTECEDENTES	6
1.1 La contaminación atmosférica en México.....	6
1.2 Fuentes de emisión y contaminantes criterio.....	7
1.3 Formación de Ozono en la atmósfera.....	10
1.4 Gestión de la calidad del aire en México Legislación y normatividad vigentes.....	11
1.5 Modelos de calidad del aire.....	14
1.6 Inventarios de emisiones.....	15
1.7 Bases de datos de emisiones para modelos de calidad del aire.....	19
1.8 Técnicas de pronóstico de calidad del aire.....	20
1.9 Sistemas de pronóstico de calidad del aire. Antecedentes.....	21
CAPÍTULO 2: MATERIALES Y MÉTODOS	25
2.1 Área de estudio.....	25
2.2 Dominio de modelación.....	26
2.3 Configuración del modelo WRF-Chem.....	27
2.4 Obtención de datos.....	28
2.5 Periodos de estudio.....	31
2.6 Proceso de simulación numérica con el sistema de pronóstico.....	35
2.7 Evaluación de desempeño del modelo WRF-Chem y el sistema de pronóstico.....	37
CAPÍTULO 3: RESULTADOS Y DISCUSIÓN	41
3.1 Desempeño del modelo WRF-Chem empleando el INEM-2013 original.....	41
3.2 Obtención de factores de escalamiento. Condiciones iniciales a partir del INEM-2013 optimizado.....	45
3.3 Desempeño del modelo WRF-Chem empleando el INEM-2013 optimizado.....	47
3.4 Validación de los factores de escalamiento empleados en el proceso de optimización del IE.....	56
3.5 Evaluación de desempeño del sistema de pronóstico de calidad del aire para los años 2018 y 2019....	63
CONCLUSIONES	68
RECOMENDACIONES	71
REFERENCIAS.....	72

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 Área de estudio	25
Figura 2 Dominio de modelación	26
Figura 3 Metodología de ajuste de emisiones en el INEM-2013 mediante modelación con WRF-Chem para la obtención de concentraciones de O ₃ similares a las observadas.....	30
Figura 4 Series de tiempo de las concentraciones horarias de O ₃ observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017). Se señala el valor de la NOM-020-SSA1-2014 en 95 ppb.....	33
Figura 5 Series de tiempo de las concentraciones horarias de O ₃ observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016). Se señala el valor de la NOM-020-SSA1-2014 en 95 ppb.....	34
Figura 6 Proceso de funcionamiento del sistema de pronóstico de calidad del aire con WRF-Chem	36
Figura 7 Distribución de las estaciones de la RAMA consideradas sobre el área de estudio	37
Figura 8 Criterios de calidad para la evaluación del sistema de pronóstico definidos en función de las métricas estadísticas	39
Figura 9 Series de tiempo de todas las concentraciones horarias de O ₃ modeladas (INEM-2013 original) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)	43
Figura 10 Series de tiempo de las concentraciones máximas y medias horarias de O ₃ modeladas (INEM-2013 original) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).....	43
Figura 11 Diagrama de dispersión para las concentraciones horarias de O ₃ modeladas (INEM-2013 original) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)	44
Figura 12 Distribución espacial de las emisiones de a) y b) CO y c) y d) NO obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (15 de mayo de 2017, 03:00 y 18:00 horas.....	46
Figura 13 Series de tiempo de las emisiones de a) CO y b) NO obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (15 al 21 de mayo de 2017) para un sitio de la ZMVM	47
Figura 14 Series de tiempo de todas las concentraciones horarias de O ₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)	49
Figura 15 Series de tiempo de las concentraciones medias horarias de O ₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)	50
Figura 16 Series de tiempo de las concentraciones máximas horarias de O ₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)	50
Figura 17 Diagrama de dispersión para las concentraciones horarias de O ₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)	51
Figura 18 Porcentaje de casos dentro de los rangos definidos de concentraciones horarias de O ₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).....	52
Figura 19 Series de tiempo de las concentraciones horarias de O ₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en estaciones de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)	53
Figura 20 Distribución espacial de las concentraciones de O ₃ (en ppb) obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (20 de mayo de 2017, a) 08:00, b) 13:00, c) 16:00 y d) 18:00 horas)	55

Figura 21 Comparación entre los valores de IOA y p calculados para las distintas variables analizadas en las modelaciones a partir del INEM-2013 actualizado y original (14 al 17 de marzo de 2016)	57
Figura 22 Series de tiempo de todas las concentraciones horarias de O3 modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016).....	59
Figura 23 Diagrama de dispersión para las concentraciones horarias de O3 modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016).....	59
Figura 24 Series de tiempo de las concentraciones horarias de O3 modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016).....	60
Figura 25 Distribución espacial de las concentraciones de O3 (en ppb) obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (15 de marzo de 2016, a) 08:00, b) 13:00, c) 16:00 y d) 18:00 horas)	62
Figura 26 Serie temporal de las concentraciones de O ₃ máximas y medias diarias observadas y pronosticadas en 2018. Se indica con línea discontinua roja el umbral de la Fase I de Contingencia y en color violeta el valor límite horario normado para O ₃	62
Figura 27 Ciclo diurno de las concentraciones medias diarias de O ₃	67

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1 Algunas Normas Oficiales Mexicanas (NOM) vigentes, sus valores límite para cada contaminante y comparación con sus similares establecidos por la Organización Mundial de la Salud (OMS).....	12
Tabla 2 Parametrizaciones Empleadas en la Modelación con WRF-CHEM.....	27
Tabla 3 Activación del programa para contingencias ambientales Atmosféricas (PCAA) en la ZMVM en el año 2016.....	32
Tabla 4 Activación del programa para contingencias ambientales atmosféricas (PCAA) en la ZMVM en el año 2017.....	32
Tabla 5 Definición de las métricas estadísticas empleadas para evaluar el desempeño del modelo WRF-Chem.....	38
Tabla 6 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación para las variables meteorológicas y contaminantes analizados (15 al 21 de mayo de 2017, INEM-2013 original).....	42
Tabla 7 Factores de escalamiento obtenidos por contaminante y tipo de fuente.....	45
Tabla 8 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación para las variables meteorológicas y contaminantes analizados (15 al 21 de mayo de 2017, INEM-2013 actualizado).....	48
Tabla 9 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación de O ₃ para estaciones seleccionadas de la rama (15 al 21 de mayo de 2017, INEM-2013 actualizado).....	54
Tabla 10 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación para las variables meteorológicas y contaminantes analizados (14 al 17 de marzo de 2016, INEM-2013 actualizado).....	57
Tabla 11 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación de O ₃ para estaciones seleccionadas de la rama (14 al 17 de marzo de 2017, INEM-2013 actualizado).....	61
Tabla 12 Métricas estadísticas obtenidas para las variables meteorológicas y químicas consideradas	63
Tabla 13 Métricas estadísticas para el O ₃	64
Tabla 14 Criterios de calidad en el pronóstico de O ₃ para todas las estaciones, periodos y métricas en el año 2018.....	67
Tabla 15 Resultados del análisis categórico para los límites de excedencia indicados.....	67

INTRODUCCIÓN

La contaminación atmosférica se define como la alteración de la composición química media de la atmósfera a niveles de concentración de los contaminantes que producen efectos medibles e indeseables para la salud humana y otros elementos del medio ambiente como animales, vegetación, materiales de la construcción y ecosistemas (Seinfeld y Pandis 2006). Puede ocurrir por causas naturales asociadas a erupciones volcánicas, incendios forestales no provocados o la actividad de algunos seres vivos, aunque la contaminación más constante y dañina se debe a causas antropogénicas relacionadas con las actividades del ser humano, sobre todo a aquellas vinculadas a los procesos industriales y a la quema de combustibles fósiles (Finlayson et al. 1999).

Según la Organización Mundial de la Salud (OMS), para el año 2016 la contaminación ambiental alcanzó proporciones alarmantes, pues 9 de cada 10 personas respiraban aire con altos niveles de sustancias tóxicas para su salud, mientras que 8 millones morían por causas asociadas a la polución, responsable del 25% de las muertes en niños menores de 5 años. Así mismo, la OMS reconoce que dicha problemática ocasiona el 24% de las muertes de adultos por cardiopatías, del 25% de las ocurridas por accidentes cerebrovasculares, del 43% de las asociadas a neumopatía obstructiva crónica y del 29% de los decesos por cáncer de pulmón, a nivel mundial (OMS 2016). Otras consecuencias están dadas por el deterioro de materiales por abrasión, la lluvia ácida o el debilitamiento de la capa de ozono, entre otras (Finlayson et al. 1999).

Múltiples ciudades a nivel mundial presentan elevados índices de calidad del aire, sobre todo en los últimos años, destacándose en este sentido los países de China e India, incluyendo sus respectivas capitales Beijing y Delhi, mientras que Santiago de Chile (Chile), Lima (Perú) y la Ciudad de México (México) constituyen las más afectadas en Latinoamérica. El vertiginoso desarrollo industrial junto al crecimiento de la población ha provocado un aumento continuo de la quema de combustibles fósiles para la producción de energía, lo cual ha influido a su vez en el aumento de las emisiones de sustancias nocivas a la atmósfera. (SAN 2014)

En el caso específico de México, el Inventario Nacional de Emisiones en su versión de 2013 (INEM-2013) indica que en ese año se emitieron a la atmósfera 32.8Gg de contaminantes a nivel nacional, 59% provenientes de fuentes de área, 31% de fuentes móviles y 10% de fuentes fijas, mientras que más del 80% de las emisiones totales son de origen antropogénico (INECC 2018). Existen serias afectaciones en la calidad del aire en las principales zonas metropolitanas del país, con especial atención para la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM), en la cual los contaminantes criterio ozono (O_3) y el material particulado, tanto de diámetro menor a $10\mu m$ (PM_{10}) como menor a $2.5\mu m$ ($PM_{2.5}$), son responsables de casi la totalidad de los episodios de alta contaminación, alcanzándose concentraciones muy elevadas y dañinas para la salud de la población. Entre las principales fuentes de emisión en el área se encuentra el parque vehicular, un número importante de industrias, comercios y servicios (SEMARNAT 2015). Por ende, la gestión de la calidad del aire en México y específicamente en la ZMVM, ha adquirido gran relevancia (INECC 2018)

Entre 1991 y 2014, la aplicación de políticas públicas para mejorar la calidad del aire en la ZMVM, permitió la reducción de los niveles de algunos contaminantes como O_3 y PM_{10} , reduciéndose el número de días del año con concentraciones superiores a los límites normados para O_3 , de 98% en 1991 a 48% en 2012, mientras que, para el PM_{10} , de 90% en 1997 disminuyó a un 35% en 2014. Sin embargo, en los últimos años, esta tendencia se ha revertido, aumentando en 2017 hasta un 64% en el caso de O_3 y un 47% para PM_{10} . De esta forma, va creciendo cada vez más la frecuencia con la cual se activa la contingencia ambiental en la ZMVM, y se limitan las actividades al aire libre a la población, con el objetivo principal de proteger su salud. Además, se restringe la circulación vehicular según el programa establecido. Lo anterior conlleva a la continua búsqueda de alternativas viables para enfrentar esta adversa situación de forma tal que los tomadores de decisiones puedan diseñar y evaluar políticas públicas ambientales para mejorar la calidad del aire en el país o enfrentar sus consecuencias.

Los modelos de calidad del aire (MCA) son una poderosa herramienta para estudiar el transporte y la dinámica de los contaminantes en la atmósfera, simulando los procesos físicos y químicos que en ella ocurren e influyen en su distribución (Turtós et al. 2013).

Varias son las investigaciones realizadas para el área del Centro de México en los últimos años empleando MCA o desarrollando herramientas para ellos, con diferentes propósitos, tales como: García-Reynoso (2002), Ortiz (2005), García-Reynoso et al. (2009), Zavala et al. (2009), Zhang y Dubey (2009), Zhang et al. (2009), Song et al. (2010), Jazcilevich et al. (2011), Almanza et al. (2014), García-Escalante (2014), Guevara et al. (2017), García-Reynoso et al. (2018), entre otras.

A pesar de que todos los trabajos mencionados anteriormente, de una forma u otra, han aportado conocimientos muy valiosos al tema, estos se enfocan, de manera general, en el análisis de eventos ya ocurridos, o sea, brindan información sobre la calidad del aire cuando ya las consecuencias son inevitables, a modo de estudio de caso. Por tanto, surge la necesidad de desarrollar sistemas de pronóstico de calidad del aire, que permitan predecir el comportamiento de los diferentes contaminantes que afectan la calidad del aire, conocer sus concentraciones y sus posibles valores extremos que comprometan la salud de la población, así como el momento aproximado en que ese evento adverso pueda ocurrir, para así brindar a una información completa, precisa y con tiempo suficiente de antelación que permita tomar medidas efectivas de manera previa.

Muchos países en el mundo ya cuentan con esta herramienta operativa. En México, la Secretaría de Medio Ambiente del Gobierno (SEDEMA) de la Ciudad de México, en colaboración con el Centro de Supercómputo de Barcelona (CSB), presentaron en 2017 un sistema de pronóstico que genera salidas horarias con resolución espacial de 1km x1km y cobertura que abarca a la ZMVM, empleando de manera integrada el modelo meteorológico WRF (*Weather Research and Forecasting Model*) con el modelo de transporte químico CMAQ (*Community Multi-scale Air Quality*), el cual se mantiene operativo en la actualidad.

Además, especialistas del Centro de Ciencias de la Atmósfera (CCA) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), desarrollaron en 2006, un sistema de pronóstico de calidad del aire para predecir niveles de contaminación en el Centro de México, combinando y acoplando la información que aportan el modelo meteorológico mesoescalar de quinta generación MM5 con el de calidad del aire MCCM (*Multiscale Climate Chemistry Model*).

En 2010 se comenzó a utilizar el modelo WRF-Chem (*Weather Research and Forecast with Chemistry*), el cual se encuentra en modo operativo actualmente, pero en cuya configuración existen limitaciones que han sido identificadas y pueden modificarse, contribuyendo a que esta herramienta de gestión de calidad del aire en México, útil y novedosa, se encuentre al nivel del estado del arte internacional en la materia.

Teniendo en cuenta lo anterior, en este trabajo de investigación se presenta el desarrollo e implementación de un nuevo sistema de pronóstico de calidad del aire para el Centro de México a partir del ya existente, con mejoras enfocadas en el acoplamiento del modelo meteorológico con el químico, la actualización del inventario de emisiones (IE) que utiliza como datos de entrada para realizar las simulaciones, el empleo de emisiones dinámicas que consideren factores de modificación asociados, por ejemplo, a los diferentes días de la semana, así como la incorporación de una herramienta que permita la evaluación en tiempo casi real de las salidas de pronóstico del sistema de modelación respecto a las observaciones disponibles de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico (RAMA).

Para el caso específico de la actualización del IE, se aplica el modelo de distribución espacial, temporal y de especiación química (DiETE, García-Reynoso et al. 2018) al INEM-2013 para obtener una base de datos de emisiones (BDE) que pueda utilizarse en el sistema de modelación, la cual se optimiza a partir de una metodología no paramétrica basada en la obtención continua de factores de escalamiento y que ha sido utilizada ya en trabajos previos (García-Reynoso 2002, Hernández 2006, Urías 2015, Trejo 2017). De esta forma, se espera que el desempeño del sistema de pronóstico sea mucho más favorable y los resultados de las simulaciones numéricas sean mucho más cercanos a las observaciones disponibles en cualquier periodo de tiempo que se desee modelar.

Una vez establecida la configuración más óptima posible, se realiza una evaluación del desempeño del sistema de pronóstico para el área de interés, tanto discreta como categórica, en el período que abarca los años 2018 y 2019, siguiendo las metodologías publicadas en Chuang et al. (2011); Chai et al. (2013); Yahya et al. (2014); Zhou et al. (2015); Zabkar et al. (2015) y Zhou et al. (2017), con resultados contrastantes.

Hasta la actualidad, no se ha desarrollado ningún protocolo específico para la evaluación de sistemas de pronóstico de calidad del aire que sea aceptado a nivel internacional, por lo que en este estudio se utilizan estadísticos comunes empleados para este fin.

Se tiene como **HIPÓTESIS**:

- Es posible desarrollar e implementar un sistema de pronóstico de calidad del aire capaz de predecir el comportamiento de los contaminantes atmosféricos criterio en el área del Centro de México a través de la simulación numérica con el modelo WRF-Chem.

Se define como **OBJETIVO GENERAL**:

- Predecir el comportamiento de los contaminantes atmosféricos criterio en el área del Centro de México a través de un sistema de pronóstico de calidad del aire.

Se plantean como **OBJETIVOS ESPECÍFICOS**:

- Establecer una configuración del modelo WRF-Chem para el pronóstico de calidad del aire en el centro de México y definir una metodología para su implementación y ejecución.
- Desarrollar una metodología para la actualización del Inventario Nacional de Emisiones de 2013 para su uso en la modelación numérica de la atmósfera.
- Actualizar las bases de datos de emisiones a emplearse en el pronóstico de calidad del aire.
- Evaluar el desempeño del sistema de pronóstico en la predicción de las concentraciones de los principales contaminantes criterio en el Centro de México para los años 2018 y 2019.

CAPÍTULO 1: FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA Y ANTECEDENTES

En este capítulo se aborda el tema de la contaminación atmosférica en México, la normatividad y legislación vigentes, las fuentes de emisión y los contaminantes criterio principales que afectan la calidad del aire, con énfasis en el proceso de formación de O₃. Se expone la influencia de la meteorología en el estado de la calidad del aire, así como la importancia de los modelos como herramienta para estudiar esta problemática. Adicionalmente, se brinda un acercamiento al tema de los inventarios de emisiones y la obtención de bases de datos para inicializar los modelos numéricos, así como al origen y desarrollo de los sistemas de pronóstico de calidad del aire a nivel mundial.

1.1 La contaminación atmosférica en México

México es uno de los países que más problemas ha presentado en los últimos años con relación a la contaminación atmosférica, caracterizada por altos niveles de sustancias en el aire que provocan una mala calidad del mismo, principalmente partículas como PM₁₀, PM_{2.5} y O₃. En el caso específico de la ZMVM, constituye el centro socioeconómico más importante del país y concentra gran parte de las actividades industriales y comerciales de la nación, generando un 20 % del producto interno bruto, además de ser la urbe más poblada de México con más de 22 millones de personas. Por estas mismas causas mencionadas, la ZMVM se ha convertido en la metrópoli con peores niveles de contaminación atmosférica del país y una de las zonas de peor calidad del aire a nivel mundial, afectando a su vez, principalmente, a las áreas aledañas más próximas.

En la ZMVM, el número de días que se rebasa la norma horaria de calidad del aire establecida en México (95ppb) es muy elevado, con más del 40% de los días del año en 2011 y más del 50% en 2015, aunque ambos datos continúan por debajo del 80% registrado en 2000, teniendo en cuenta que la norma ha tenido variaciones. Además, según el INEM-2013, solamente en la ZMVM se emiten a la atmosfera anualmente más de 745Gg de contaminantes primarios, de cuyo total cerca del 80% provienen de los más de 5 millones de autos registrados, con tecnologías que tienen, como promedio, más de 12 años de antigüedad. Adicionalmente, deben considerarse las emisiones provenientes del Estado de México y transportadas a la ZMVM por efectos del viento.

1.2 Fuentes de emisión y contaminantes criterio

Una fuente de emisión se define como todo proceso o actividad que libera, emite o expulsa un contaminante hacia la atmósfera, pudiéndose clasificar de acuerdo a dos criterios principales: según el proceso que origina la emisión en naturales y antropogénicas y según la potencia, agrupación y orientación de la emisión en puntuales, de área y móviles. En los estudios sobre contaminación atmosférica, se considera un conjunto de sustancias denominadas como contaminantes criterio, liberados a la atmósfera en cantidades considerables y provenientes de diferentes fuentes o que se forman derivados de los primarias, pudiendo provocar consecuencias negativas para la salud y el bienestar humano, dentro de las cuales se encuentran: el dióxido de azufre (SO₂), el dióxido de nitrógeno (NO₂), el monóxido de carbono (CO), el material particulado (PM, PM₁₀ y PM_{2.5}) y el ozono (O₃) (López, 2008)

En el caso de la ZMVM, según el INEM-2013, las fuentes antropogénicas son las responsables de más del 99% de las emisiones totales de contaminantes primarios a la atmósfera, destacándose en primer lugar las fuentes móviles, las cuales aportan más del 75% del total, incluyendo el 97% de CO, el 90% de los Óxidos de Nitrógeno (NO_x) y el 94% de SO₂. En segundo lugar, por orden de importancia, se encuentran las fuentes de área, causantes del 20% de las emisiones totales, así como del 80% del NH₃ emitido al aire, del 70% de los Compuestos Orgánicos Volátiles (COV) y del 40% del PM₁₀ y el PM_{2.5}. Las fuentes fijas se relacionan fundamentalmente con las emisiones de PM₁₀ (14%) y PM_{2.5} (13%). Las fuentes naturales tienen muy poca influencia en este sentido, con apenas un 1%, aproximadamente (INECC 2013).

A continuación se describen los principales contaminantes criterio, algunas de sus características y afectaciones a la salud humana y bienes materiales (Rodríguez, 2016).

1.2.1 Monóxido de Carbono (CO)

El CO es contribuyente indirecto al efecto de invernadero y un importante contaminante primario del aire en los medios urbanos y zonas con presencia de fuentes antropogénicas como los vehículos automotores con consumo de combustibles derivados del petróleo.

En un gas incoloro, casi inodoro, insípido, no irritante, pero muy inflamable, tóxico para los humanos y que, en altas concentraciones, puede ser letal, impidiendo el transporte de oxígeno a la sangre.

Este contaminante se produce por combustión incompleta de combustibles sólidos, líquidos y gaseosos, así como por oxidación de todos los hidrocarburos (isopreno, etano, propano, etileno, propilenos, etc.) y no es un GEI significativo pues absorbe pequeñas cantidades de radiación infrarroja terrestre. Sin embargo, tiene influencia en la capacidad oxidante de la atmósfera, mediante su interacción con los radicales hidroxilos (OH) y por esta vía influye sobre las concentraciones de otros GEI como el dióxido de carbono (CO₂), el ozono troposférico, halocarbonos, etc. Indirectamente, afecta también a las concentraciones de metano debido a que es el mayor sumidero para los radicales OH.

Después del CO₂, es el contaminante emitido en mayor cantidad al aire. Tiene un tiempo de vida de 1-3 meses y, por esta razón, puede ser ampliamente distribuido en la atmósfera antes de su oxidación a CO₂.

1.2.2 Óxidos de Nitrógeno (NO_x)

Los NO_x de forma general son emitidos a la atmósfera en grandes volúmenes de manera natural (provenientes de la descomposición bacteriana de nitratos orgánicos e incendios forestales) o antropogénica (quema de combustibles en los vehículos automotores y calefacción, la producción de energía eléctrica y los procesos industriales), siendo los más importantes el NO y el NO₂.

El NO₂ tiene mayor importancia por sus impactos sobre la salud humana asociados a problemas en la percepción olfativa, molestias respiratorias, dolores agudos y edemas pulmonares. Tiene influencia en la formación de O₃ y aerosoles de nitratos, así como en la acidificación de la lluvia. Es considerado un contaminante criterio.

Sus fuentes principales en las ciudades son la quema de combustibles en los vehículos de motor que normalmente dominan las emisiones en el medio urbano, la producción de energía eléctrica y los procesos industriales. La mayor parte de los NO_x se emite a la atmósfera como NO, siendo este oxidado, posteriormente, a NO₂ ya en la atmósfera.

1.2.3 Dióxido de Azufre (SO₂)

El SO₂ es un gas incoloro con un olor muy penetrante que se genera con la combustión de fósiles como el carbón y el petróleo, producto de la generación de electricidad, los vehículos automotores y la calefacción doméstica.

Puede afectar el sistema respiratorio y las funciones pulmonares, causando irritación ocular, tos, secreción mucosa y agravamiento del asma y la bronquitis crónica, ingresos hospitalarios por cardiopatías y un aumento de la mortalidad por exposición a altos niveles de concentraciones. En combinación con el agua, el SO₂ se convierte en ácido sulfúrico (H₂SO₄), principal componente de la lluvia ácida que causa la deforestación, siendo además precursor de la formación de aerosoles de sulfatos.

1.2.4 Partículas (PM₁₀ y PM_{2.5})

Consisten en una compleja mezcla de partículas sólidas y líquidas de sustancias orgánicas e inorgánicas suspendidas en el aire y son un indicador representativo muy común de la contaminación del mismo. Están compuestas principalmente por los sulfatos, los nitratos, el amoníaco, el cloruro de sodio, el hollín, los polvos minerales y el agua, así como algunas especies como el carbón elemental y compuestos orgánicos.

Si bien las partículas con un diámetro inferior a 10µm (PM₁₀) pueden penetrar y alojarse profundamente dentro de los pulmones, existen otras aún más dañinas para la salud, que son aquellas con un diámetro inferior a 2.5µm (PM_{2.5}), las cuales pueden atravesar la barrera pulmonar y entrar en el sistema sanguíneo. La exposición crónica a partículas contribuye al riesgo de desarrollar enfermedades cardiovasculares y respiratorias, así como cáncer de pulmón y existe una estrecha relación cuantitativa con el aumento de la mortalidad o morbilidad diaria y a largo plazo en una región.

El material particulado en general se emite a la atmósfera directamente de una fuente como automóviles, autobuses, camiones de carga, industrias, comercios, obras en construcción, vías sin pavimentar, chimeneas, humo de incendios o como consecuencia del uso de combustibles en estufas abiertas o cocinas tradicionales, aunque también existen los llamados aerosoles secundarios, los cuales se derivan de la oxidación de compuestos orgánicos volátiles, principalmente.

1.2.5 Ozono (O₃)

El O₃ es un constituyente natural del aire compuesto por tres átomos de oxígeno y con un alto poder oxidante debido a la inestabilidad de su estructura molecular, lo cual le permite reaccionar con una gran cantidad de sustancias.

Es un gas traza que puede tener efectos corrosivos sobre materiales, irritar mucosas de los seres vivos, dañar a las plantas (fototóxico) y es un importante factor de mortalidad y morbilidad por problemas respiratorios (asma, reducción de función pulmonar, etc.)

El O₃ estratosférico se encuentra de manera natural a unos 20-25 km de altitud formando la denominada "Capa de Ozono", la cual tiene gran importancia para la vida en la Tierra como filtro de absorción de la radiación ultravioleta del Sol, que puede ser muy perjudicial sobre la superficie planetaria, garantizando además el equilibrio radiativo de la estratosfera. Sin embargo, el O₃ troposférico, se forma de manera espontánea y constituye uno de los principales contaminantes del aire por sus efectos nocivos para la salud humana y los bienes materiales, la alteración de la actividad fotosintética de las plantas, además de actuar como un gas de efecto invernadero.

1.3 Formación de Ozono en la atmósfera

El O₃ que se encuentra presente en la superficie y es perjudicial para la salud, tiene dos orígenes principales: estratosférico (debido al intercambio estratósfera-tropósfera) o por formación fotoquímica a partir de sus precursores naturales y antropogénicos. Entre ambos, la contribución más importante proviene del origen fotoquímico, a partir de reacciones químicas de sus precursores principales que son emitidos a la atmósfera, en este caso NO_x y COV, en presencia de radiación solar.

En el caso de los NO_x, la formación de O₃ se inicia con la fotodisociación del NO₂ (Blacet, 1952) en presencia de la radiación solar, formándose NO y O (Oxígeno monoatómico altamente reactivo), el cual se combina con el O₂ (Oxígeno molecular) en presencia de una molécula de aire para formar O₃ muy inestable, que en presencia de NO se reduce con facilidad y rapidez, para finalmente producir de nuevo NO₂ y O₂

En ese ciclo de formación de O_3 , existe un equilibrio dinámico entre O_3 , O_2 , O y NO_x de formación y destrucción de O_3 , lo cual explica que sus concentraciones medidas en las ciudades sean en ocasiones menores que en el resto, pues al ser mayor las emisiones de NO producidas por el transporte, estas destruyen las moléculas de O_3 que se crean durante el ciclo. Esto demuestra la acción contrapuesta de los NO_x en la formación de O_3 , siendo muy importante mantener un equilibrio NO/NO_2 en la atmósfera.

En cuanto a los COV en el origen de O_3 , estos consumen el NO existente en la atmósfera para producir NO_2 , alterando el ciclo anterior y evitando que el O_3 reaccione con el NO , acumulándose entonces en la atmósfera. El tiempo de vida del O_3 en la atmósfera depende de la presencia y abundancia de sus precursores, registrándose las concentraciones más elevadas durante las horas del día de mayor radiación solar. No obstante, esta relación O_3 - NO_x -COV es muy compleja y la dependencia química entre ellos no es lineal, o sea, los procesos de formación de O_3 no son directamente proporcionales a los cambios en las concentraciones de sus precursores. Por lo tanto, no siempre es posible trazar una estrategia de control de emisiones que garantice el éxito de reducir las concentraciones de O_3 a partir de una reducción de NO_x o COV, sino que es preciso modelar escenarios para su evaluación previa.

1.4 Gestión de la calidad del aire en México. Legislación y normatividad vigentes

La gestión de la calidad del aire en México ha adquirido mayor relevancia a lo largo de los años. Se llevan a cabo acciones y se desarrollan herramientas para estudiar la calidad del aire en el país, con el objetivo de diseñar y evaluar políticas públicas ambientales para mejorar la calidad del aire en México o enfrentar sus consecuencias.

En la actualidad, se realiza el monitoreo de la concentración atmosférica de los principales contaminantes criterio: SO_2 , NO_2 , CO , O_3 , $PM_{2.5}$ y PM_{10} , a través de los Sistemas de Monitoreo de Calidad del Aire (SMCA), distribuidos en las entidades federativas del país. Estos están constituidos por más de 200 estaciones de monitoreo, cuyos datos son difundidos principalmente por el Sistema Nacional de Información de la Calidad del Aire (SINAICA), paso inicial muy necesario para conocer las condiciones de contaminación existentes.

Adicionalmente, en algunas de estas estaciones se realizan mediciones de variables meteorológicas de superficie y en otras se utilizan equipos manuales para la recolección de muestras de partículas suspendidas y de depósito atmosférico. Todo esto con el objetivo de recopilar información para describir y caracterizar el estado de la calidad del aire en el país y evaluar el cumplimiento de las normas emitidas por parte de la Secretaría de Salud, donde se establecen las concentraciones máximas permitidas para los distintos contaminantes criterio en diferentes periodos de tiempo de exposición, en términos de los riesgos que representan para la salud humana.

En la Tabla 1 se muestran algunas de la Normas Oficiales Mexicanas de Salud Ambiental (NOM) vigentes en el país, cuya elaboración y actualización es responsabilidad de la SEMARNAT. No obstante, a pesar de los esfuerzos que se realizan, aun distan mucho de las establecidas por la OMS, como puede apreciarse.

Tabla 1 Algunas Normas Oficiales Mexicanas (NOM) vigentes, sus valores límite para cada contaminante y comparación con sus similares establecidos por la Organización Mundial de la Salud (OMS)

Contaminante	NOM	Valores Límite NOM	Valores Límite OMS	Periodo (Promedio)
		95 ppb	-	1 hora
O₃	NOM-020-SSA1-2014	70 ppb	*100 µg/m ³	8 horas
			**60 µg/m ³	
SO₂	NOM-022-SSA1-2010	200 ppb	-	1 hora
		110 ppb	40 µg/m ³	24 horas
CO	NOM-021-SSA1-1993	11000 ppb	-	8 horas
NO₂	NOM-023-SSA1-1993	210 ppb	200 µg/m ³	1 hora
PM₁₀	NOM-025-SSA1-2014	75 µg/m ³	45 µg/m ³	24 horas
PM_{2.5}	NOM-025-SSA1-2014	45 µg/m ³	15 µg/m ³	24 horas

En el caso del O₃, la OMS establece un valor en 100 µg/m³ (*) como máximo diario de período de 8 horas (percentil 99, 3-4 días de superación por año) y 60 µg/m³ (**) como promedio de períodos de 8 horas en temporada máxima, dada por la media de concentraciones máximas diarias de O₃ en períodos de 8 horas durante los seis meses consecutivos con el promedio móvil más alto.

Por otra parte, los índices de calidad del aire constituyen herramientas que los gobiernos utilizan para notificar a la población el nivel de contaminación en el aire, los riesgos a la salud asociados y las recomendaciones para reducir su exposición. En el caso específico de la ZMVM, desde 1986 se difunde el Índice Metropolitano de la Calidad del Aire (IMECA) que ha funcionado como valor de referencia para el área, el cual, desde 2006, tiene fundamento en la Norma Ambiental del Distrito Federal NADF-009-AIRE-2006, estableciéndose los requisitos para su cálculo a partir de los promedios horarios de las concentraciones de cinco contaminantes criterio: O₃, SO₂, NO₂, CO y PM₁₀.

En su última actualización, a través de la norma NADF-009-AIRE-2017, el IMECA cambia de nombre a “Índice de Calidad del Aire” y se desarrolla con base en el algoritmo de la EPA, donde el valor de 100 puntos del índice equivale a la cifra de la norma oficial mexicana en materia de salud ambiental correspondiente a cada contaminante; se considera una mala calidad del aire cuando el índice supera ese valor.

Se empleaban cinco categorías para reportar la calidad del aire y se publicaba de manera horaria para cada una de las estaciones automáticas de monitoreo de la calidad del aire en la ZMVM, estando disponible en internet para toda la población.

En este sentido debe agregarse que, a pesar de existir en México unos 34 sistemas de monitoreo ambiental, distribuidos en 30 entidades federativas, sólo 15 de ellas generan un índice de calidad del aire propiamente dicho. Lo anterior propició que en el mes de noviembre de 2019, a partir de la necesidad de unificar y estandarizar la información disponible y los métodos para la obtención de los niveles de contaminación en el país, la SEMARNAT y el Gobierno Federal publicaran la norma NOM-172-SEMARNAT-2019, en la cual se establecieron los lineamientos para la obtención y comunicación de un nuevo Índice de Calidad del Aire y Riesgos a la Salud denominado “INDICE AIRE Y SALUD”, el cual entró en funcionamiento el 18 de febrero de 2020.

Este nuevo índice es útil para todos los gobiernos estatales y municipales responsables del monitoreo ambiental a nivel nacional y relaciona de manera directa la concentración de cada contaminante criterio a una categoría de calidad del aire y a un nivel de riesgo, así como a las recomendaciones para grupos sensibles y población en general.

Cuando se registra un episodio de contaminación severa (a partir de la categoría IMECA de Muy Mala) y las concentraciones de O₃, PM₁₀ o PM_{2.5} alcanzan niveles que ponen en riesgo la salud de la población en general, se activa el Programa para Contingencias Ambientales Atmosféricas (PCAA) el cual considera la aplicación de un conjunto de medidas encaminadas a reducir los niveles de contaminación en el aire que se presentan y preservar la salud de la población y los bienes materiales. Aquí se incluye la suspensión parcial o total de actividades al aire libre, la restricción de la circulación vehicular a través de la aplicación del programa “Hoy No Circula”, la disminución de la actividad industrial y energética, así como la activación de un programa de vigilancia epidemiológica especial creado para este tipo de situaciones.

De igual forma, destaca en este sentido el trabajo de los Comités ProAire, los cuales realizan un trabajo coordinado para mejorar la calidad del aire en el país. Actualmente, existen 32 vigentes, 6 de ellos en zonas metropolitanas y 26 estatales.

Como complemento a todas estas acciones que se han llevado a cabo en el país, también se trabaja de forma simultánea en el desarrollo de otras herramientas para evaluar y caracterizar la calidad del aire de una zona determinada y apoyar en el proceso de toma de decisiones, dentro de las cuales se destacan los modelos de calidad del aire.

1.5 Modelos de calidad del aire

Los modelos de calidad del aire (MCA) constituyen una potente herramienta físico-matemática para la planeación, gestión e incluso predicción del comportamiento de los distintos contaminantes del aire dentro de una región, ya que facilitan la simulación de los procesos físicos y químicos que ocurren dentro de la atmósfera y que afectan a la dispersión y transformación de los contaminantes primarios emitidos directamente a la misma, generando como resultado la concentración ambiental de la sustancia simulada. Algunos MCA incluyen además las reacciones químicas que intervienen en la formación de contaminantes secundarios como el ozono.

En general, los MCA poseen un amplio espectro de aplicación que va desde la evaluación de estrategias de control de emisiones y su impacto en la calidad del aire para apoyar la toma de decisiones, hasta la generación de información científica valiosa para comprender mejor la dinámica de la atmósfera y la contaminación en un lugar o región determinada, incluyendo el pronóstico de la calidad del aire. Además, se han convertido en una de las principales vías para identificar la responsabilidad de una fuente en los niveles de contaminación de una región, seleccionar localizaciones de futuras fuentes minimizando sus impactos, establecer una legislación para el control de emisiones y evaluar estrategias de control de episodios de contaminación mediante casos de estudio que son simulados mediante experimentos numéricos.

Una vez validado y adaptado a las condiciones de la zona donde se aplique, un modelo numérico siempre constituye una herramienta más económica, rápida y representativa para evaluar la calidad del aire que las mediciones, aunque ambos deben complementarse (Turtós 2013).

Entre los modelos numéricos de última generación que se han implementado en el país en los últimos años se encuentra el WRF-Chem (Weather Research and Forecasting with Chemistry), ampliamente utilizado para realizar estudios de química atmosférica. Sin embargo, para su aplicación, se necesita la integración sistemática de una gran cantidad de información generada por diferentes fuentes, tales como: inventario de emisiones, meteorología, topografía, uso de suelo, entre otros, en conjunción con el empleo de distintos mecanismos químicos, parametrizaciones, herramientas de postprocesamiento y visualización, etc. durante todo el proceso de simulación.

1.6 Inventarios de emisiones

Los inventarios de emisiones (IE) de contaminantes atmosféricos son documentos elaborados por las autoridades ambientales y que contienen las cantidades de las emisiones de los principales contaminantes criterio generadas en un área determinada (por lo general un país) e incorporadas al aire en un periodo de tiempo dado, las cuales son provenientes de todas las fuentes y sectores, tales como: industria, transporte, comercio, servicios, hogares, vegetación, suelo, entre otros (SEMARNAT 2015).

Para conformar un IE se realiza la recopilación de información sobre las emisiones provenientes de distintas fuentes para cuantificarlas bajo condiciones normales de emisión e identificar los contaminantes específicos que emiten, con énfasis en los considerados como criterio. Dentro de los principales métodos se encuentran:

- **Muestreo en la fuente:** consiste en mediciones directas de las emisiones en la fuente. Se emplean métodos, procedimientos y manejo de datos específicos para cada tipo de fuente, establecidos por la EPA (Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos) y complementados por las correspondientes normas nacionales, para el país en cuestión.

- **Modelos de emisión:** consiste en la estimación de las emisiones por medio de la simulación computacional, empleando grandes volúmenes de datos para alimentarlos. Producen estimaciones muy exactas respecto a las obtenidas por otros métodos, pero siempre su eficiencia dependerá de la calidad de los datos y las suposiciones en las cuales se basa el inventario. Se pueden clasificar en tres tipos:
 - ✓ **Modelos adaptativos:** se basan en paquetes computacionales que integran redes neuronales y sistemas caóticos. Durante la primera etapa se carga el programa con los datos históricos y datos de emisiones, después los parámetros de operación se monitorean y son utilizados por el sistema del programa para poder predecir las emisiones.

 - ✓ **Modelos mecanísticos:** se fundamentan en ecuaciones que han sido desarrolladas utilizando fundamentos físico-químico-biológicos para describir la tasa de emisión de un tipo de fuente y requieren de muchas variables para calcular las emisiones.

 - ✓ **Modelos de emisiones al aire de agua y aguas residuales:** cada modelo requiere de diferentes y específicos parámetros relacionados con la emisión de contaminantes al aire provenientes del agua y aguas residuales.

- **Factores de emisión:** establecen una relación entre la cantidad de contaminante emitido a la atmósfera y una unidad de actividad, la cual puede basarse en procesos tales como la producción, horas de operación, área superficial, entre otros. Se usan para calcular emisiones cuando los datos de monitoreo no están disponibles. Se pueden clasificar en dos tipos principales:

✓ **Factores de emisión basados en procesos:** se utilizan para estimar emisiones de fuentes puntuales, dado que con frecuencia no es factible hacer muestreos para cada fuente emisora en particular y así, los resultados de los muestreos en “fuentes representativas” se emplean para obtener factores de emisión comunes, los cuales se expresan generalmente en forma de masa de contaminante emitido por unidad de proceso.

✓ **Factores de emisión basados en censos:** se emplean generalmente para estimar emisiones de fuentes emisoras dispersas y numerosas (fuentes de área) y son más exactos cuando se aplican a una región para la cual el factor de emisión fue desarrollado. Se clasifican en: per cápita, por empleado y empíricos.

- **Balance de materiales:** utilizado para estimar emisiones de muchas categorías de fuentes y puede ser usado cuando no existan datos disponibles de muestreos, factores de emisión u otros métodos ya descritos, siendo mucho más sencillo y costeable. Para desarrollarlo, se necesita un análisis del proceso para determinar si las emisiones pueden ser estimadas con los parámetros específicos de operación y las composiciones de los materiales y es necesario conocer la concentración o cantidad del material en cada punto a lo largo del proceso

- **Extrapolación:** consiste en el escalamiento de las emisiones de una fuente a otra, teniendo como base un parámetro de escalamiento conocido para ambas fuentes. Puede emplearse para calcular emisiones directamente y verificar las realizadas por otros métodos. Se considera el enfoque menos deseable para estimar emisiones, dada su tendencia a la inexactitud, al no tomar en cuenta de manera apropiada diferencias importantes entre las dos regiones donde se ubiquen ambas fuentes consideradas.

Existen otros elementos de los IE que pueden definirse, tales como:

- **Año base:** año para el cual se han de estimar las emisiones y establece la posición del IE en el tiempo para que todas las estimaciones tengan una base común y representen las actividades que ocurrieron durante el mismo periodo. Constituye además una base de comparación con otros IE previos y posteriores.
- **Características temporales:** se refiere al periodo de tiempo y la variabilidad temporal del IE. El primero describe el lapso temporal representado por el IE, normalmente de un año, pero que puede ser de un día, un mes, estacional, entre otros; mientras que el segundo, indica la fluctuación de las emisiones en el tiempo, que puede ser constante o variar de una base estacional, mensual, diaria o incluso horaria.
- **Características espaciales:** se refiere al dominio del IE y su resolución espacial. El primero representa el área para la cual las fuentes de contaminantes atmosféricos serán inventariadas (principalmente limitado por fronteras políticas o geográficas); mientras que la segunda describe el nivel de especificidad de la ubicación geográfica de las fuentes de contaminación.
- **Resolución de especies químicas (Especiación):** se refiere a la desagregación de un contaminante del IE en sus componentes químicos individuales o en grupos químicos específicos.
- **Aseguramiento de la calidad:** se refiere al esfuerzo para poder controlar la calidad de la información y este debe ser efectuado durante todo el desarrollo del IE.
- **Proyecciones:** se refiere al pronóstico del comportamiento de un IE de un año base hacia delante o atrás en el tiempo y se utilizan para identificar tendencias pasadas y futuras de las emisiones debido al incremento en la actividad y las estrategias de control instrumentadas.
- **Estimación de la incertidumbre:** se refiere a la magnitud del error del IE y puede ser estimada cuantitativa o cualitativamente.

- **Continuidad del proceso del IE:** se refiere a la posibilidad de continuidad y actualización que tiene el IE con el transcurso del tiempo. Se pretende desarrollar IE más precisos y que contengan los datos más actuales de emisiones de contaminantes atmosféricos y aquellos asociados a las fuentes, dentro de un área geográfica determinada en un intervalo de tiempo específico.

En el caso de México, se han desarrollado seis IE con cobertura nacional, denominados Inventario Nacional de Emisiones de Contaminantes Criterio (INEM), para los años 1999, 2005, 2008, 2011, 2013 y 2016, bajo la dirección de la SEMARNAT, en colaboración con múltiples instituciones del país. Sin embargo, estos IE tienen diferencias metodológicas y de temporalidad, lo que impide su comparación en condiciones similares.

1.7 Bases de datos de emisiones para modelos de calidad del aire

Los IE constituyen instrumentos de gestión ambiental a partir de los cuales se pueden elaborar bases de datos de emisiones (BDE) que permiten describir cuantitativamente su distribución espacial y temporal en el área que consideran. Estas BDE se emplean en el proceso de inicialización de los MCA como condiciones iniciales y de frontera, permitiendo incorporar al proceso de simulación la información referente a las tasas de emisión de los distintos contaminantes, lo cual influye decisivamente en la eficiencia del modelo y en la calidad de sus resultados (Yumimoto y Uno 2006, Huang et al. 2011).

Los MCA no pueden emplear el IE de la forma en que es publicado por los responsables, sino que se requiere de un trabajo previo y transformación del mismo para integrarse al proceso de simulación. En este sentido, hay tres pasos muy importantes que se deben realizar, referentes a igual número de distribuciones, las cuales se acoplan con información geográfica y meteorológica del área de estudio (García-Reynoso 2018):

- **Distribución temporal:** desglosar los estimados anuales de emisión del IE base, teniendo en cuenta intervalos de tiempo más cortos.
- **Distribución espacial:** separar y clasificar los estimados anuales de emisión del IE base en tamaños más pequeños, homogéneos e individuales sobre el dominio de modelación seleccionado.

- **Distribución de especies químicas:** clasificar las emisiones de las especies en grupos más selectivos dependiendo de su reactividad, de las especies químicas individuales y/o del tamaño de partícula.

Sin embargo, los IE presentan un sinnúmero de incertidumbres en su proceso de elaboración, las cuales no están cuantificadas o no son reportadas por sus autores, lo que provoca que las BDE obtenidas a partir de ellos, provoquen errores en las simulaciones numéricas (Hao et al. 2002), por lo que se requiere actualización en sus datos (Li et al. 2010), elemento que ha recibido atención continua de los investigadores en temas de calidad del aire (Lumbreras et al. 2009).

1.8 Técnicas de pronóstico de calidad del aire

Una amplia variedad de técnicas, que van desde lo más simple a lo más complejo, se ha utilizado para generar predicciones de calidad del aire. Inicialmente, el trabajo se centró en la previsión de O₃ para un plazo de 1 a 3 días, aunque poco a poco se fue ampliando a otros contaminantes y periodos. Dentro de los métodos más comunes se encuentran (EPA 1999):

- **Métodos climatológicos:** consisten en asumir que el pasado es un buen predictor del futuro y se basan en una asociación de los niveles de contaminación elevados con condiciones meteorológicas específicas. La aplicación puede ser tan simple como asumiendo persistencia (es decir, si los niveles de contaminación son altos hoy pues también lo serán mañana) o puede implicar el desarrollo de sistemas de interpretación del tiempo meteorológico (identificación de patrones climáticos que se acompañan de altos niveles de contaminación) para la previsión de la calidad del aire. Son sencillos, fáciles de implementar y operar, aunque con un nivel de incertidumbre muy elevado para el desarrollo tecnológico actual.
- **Métodos estadísticos:** consisten en asociar parámetros meteorológicos con los de calidad del aire, cuantificándose mediante técnicas estadísticas. Son simples de desarrollar y utilizar y requieren recursos informáticos modestos, aunque sus resultados son algo inciertos, sobre todo para condiciones no estables de la atmósfera.

Destacan:

- ✓ **Árbol de clasificación y regresión (CART):** especializada en identificar variables meteorológicas y de calidad del aire que estén correlacionadas fuertemente entre sí y con los niveles de contaminación ambiental, las cuales se utilizan entonces para la predicción.
- ✓ **Análisis de regresión:** asociación entre los niveles de contaminantes y las diferentes variables meteorológicas, lo que puede cuantificarse con el análisis estadístico del comportamiento histórico de conjuntos de datos. La ecuación de regresión lineal resultante se puede utilizar para pronosticar los futuros niveles de contaminación.
- ✓ **Redes neuronales artificiales:** identificar los parámetros atmosféricos que influyen en la calidad del aire y cuantificar dicha asociación a través de la aplicación de aprendizaje adaptativo y de técnicas de reconocimiento de patrones como las redes neuronales, las cuales tienen la intención de imitar la forma en que el cerebro humano reconoce patrones recurrentes y han sido desarrolladas para identificar los patrones de tiempo que están asociados con niveles elevados de ozono y otros contaminantes.
- ✓ **Métodos Dinámicos:** tratan de representar matemáticamente los procesos físico-químicos de la atmósfera que afectan los niveles de contaminación del ambiente, mediante el empleo de modelos de calidad del aire que resuelven las ecuaciones primitivas o de hidrodinámica, simulando la emisión, transporte y transformación de contaminantes en el aire. Requieren costo computacional alto y su uso puede ser complejo, pero son muy eficientes y si se configuran y emplean adecuadamente, los resultados son satisfactorios.

1.9 Sistemas de pronóstico de calidad del aire. Antecedentes

Precisamente a partir de los métodos dinámicos y la integración de algunas opciones de otras técnicas, se han desarrollado los sistemas de pronóstico de la calidad del aire a nivel mundial, teniendo en cuenta información de emisiones de contaminantes, topografía, meteorología, química y procesos de deposición.

Con estos datos se predicen las concentraciones de los contaminantes atmosféricos en función del tiempo y el espacio, empleando modelos numéricos como el WRF-Chem, el cual acopla la información meteorológica y química de manera simultánea, en tanto se retroalimentan ambas en cada paso de tiempo.

Los diferentes modelos que se emplean para diagnóstico o pronóstico de calidad del aire, utilizan bases de datos de emisiones de contaminantes atmosféricos biogénicas (de origen natural) y antropogénicas (emitidas por el hombre en sus actividades). Estas pueden ser conformadas como resultados de inventarios naciones que se desarrollan en los países o mediante salidas de modelos de emisiones que aportan los valores desagregados espacial y temporalmente.

En cuanto a la información meteorológica, esta se obtiene principalmente de las salidas de modelos globales o regionales, según el área de estudio, intereses investigativos, nivel de acceso a la información o capacidad de cómputo. Las salidas incluyen variables meteorológicas como temperatura, humedad, vientos, intensidad solar, entre otras, que determinan el transporte, mezcla, formación o destrucción fotoquímica, deposición, etc., de los contaminantes analizados. La fiabilidad de la simulación meteorológica influye decisivamente en la calidad del pronóstico de calidad del aire que se realiza. Por su parte, el núcleo químico del sistema, lo conforma un modelo de química atmosférica que integra toda la información previa para pronosticar los niveles de concentraciones de los contaminantes resolviendo en casi todos los casos la ecuación de advección-difusión.

Además de los componentes de predicción, se necesita una red de observación capaz de proporcionar mediciones en tiempo real de los parámetros atmosféricos para inicializar los modelos y evaluar la calidad del pronóstico, la cual puede hacerse de forma operacional o diagnóstica. En el primer caso, se realiza una comparación directa punto a punto, de ser posible, entre los campos de contaminantes de la previsión y las observaciones disponibles; mientras que, en el segundo, se tiene en cuenta la medición también de los parámetros tanto meteorológicos como químicos que controlan la formación y distribución de los contaminantes modelados, dígase sustancias precursoras o productos intermedios, así como variables como la altura de la capa de mezcla y los vientos en altura.

En la década de los 1960s, el US Weather Bureau (USWB) emitió los primeros pronósticos de contaminación del aire utilizando modelos de predicción numérica del tiempo (Niemeyer, 1960) para determinar las condiciones atmosféricas que producían la polución, pero solo desde el punto de vista meteorológico y sin considerar las emisiones ni la química atmosférica. Posteriormente, con la creación en 1970 de la NOAA, la EPA, el National Weather Service (NWS) y el National Air Pollution Potencial Forecast Program (Gross, 1970), todos en Estados Unidos, se fueron desarrollando técnicas y herramientas para el pronóstico de calidad del aire en zonas urbanas, basadas en aproximaciones empíricas y modelos estadísticos con datos históricos (Zhang et al. 2012), dentro de los que pueden citarse a McCollister y Wilson (1975), Wolff y Lioy (1978) y Aron (1980).

Ya hacia los 1990s, el nivel de sofisticación se incrementó considerablemente, superando algunas limitaciones existentes, a partir de un mayor desarrollo de las arquitecturas computacionales, distintos avances en tecnologías de cómputo y la aplicación de los modelos tridimensionales de calidad del aire al pronóstico de calidad del aire en escalas urbana, regional y global, incluyendo condiciones meteorológicas, emisiones, química atmosférica y procesos de remoción y deposición (Zhang et al. 2012).

Los primeros sistemas de pronóstico de calidad del aire basados en modelos tridimensionales datan de mediados de los 1990s, comenzando en Alemania en 1994 (Rufeger et al. 1997), luego en Japón en 1996 (Ohara et al. 1997), en Australia en 1997 (Mannis et al. 2002) y en Canadá en 1998 (Pudykiewicz y Koziol 2001). Posteriormente sucedió la expansión a Estados Unidos (McHenry et al. 2004 y Otte et al. 2005), otros países de Europa (Brandt et al. 2001 y Jakobs et al. 2002), China (Han et al. 2002 y Wang et al. 2009), así como otras regiones de Japón (Uno et al. 2003).

Un salto cualitativo importante ocurrió con el desarrollo de repositorios de datos en tiempo real, plataformas de pronóstico de calidad del aire basadas en MCA, para proporcionar datos actuales y de pronóstico de contaminación atmosférica en un área determinada. En este sentido, en 1997, aparece en Estados Unidos el Aerometric Information Retrieval Now (AIRNow), proporcionando información de O₃ y PM para más de 400 ciudades en el país norteamericano, extendiéndose a lo largo del tiempo hasta brindar información sobre polución del aire a casi todo el planeta actualmente.

Sistemas similares se desarrollaron en Europa y el resto del mundo, destacándose, entre otros: el Canadian Hemispheric and Regional Ozone and NO_x System (CHRONOS), creado por el Meteorological Service of Canada (MSC) para la región este de Canadá (1999, extendiéndose a todo el país en 2001 (Pudykiewicz y Koziol 2001 y Pudykiewicz et al. 2003); el Australian Air Quality Forecasting System (AAQFS) que brinda pronósticos para ciudades australianas como Sydney y Melbourne desde el año 2000 (Hess et al. 2000 y Cope et al. 2003); el Air Indicator Report for Public Access and Community Tracking (AIRPACT), operado diariamente desde 2001 (Vaughan et al. 2004), siendo el primero en implementar el modelo CMAQ para realizar el pronóstico de calidad del aire en su versión AIRPACT-3 (Byun y Schere 2006); el French Air Quality Forecasting and Mapping System (PREV´AIR), operativo en Francia desde 2003 (Honoré et al. 2008 y Rouil et al. 2009); el Real-Time National Air Quality Forecast Capability (NRT-AQFC) desarrollado en Estados Unidos por NOAA y EPA en 2004 (Otte et al. 2005).

En la actualidad, varios países cuentan con sistemas de pronóstico de calidad del aire operativos, destacando la región de Europa y América del Norte. En Latinoamérica, Chile fue pionero con CHILE/Meteo Chile Polyphemus, mientras que, en México, se cuenta con el desarrollado por la SEDEMA de la Ciudad de México y el CSB, que genera salidas horarias con resolución espacial de 1km x1km sobre la ZMVM. Este sistema emplea el modelo meteorológico WRF con el modelo de transporte químico CMAQ.

De igual forma, en el Centro de Ciencias de la Atmósfera (CCA) de la UNAM, se desarrolló un sistema de pronóstico de calidad del aire en 2006 para predecir niveles de contaminación en el Centro de México, acoplado el modelo meteorológico mesoescalar de quinta generación MM5 con el de calidad del aire MCCM. Este sistema se desarrolló en 2010, considerando el modelo WRF-Chem como base del mismo el cual se encuentra en modo operativo actualmente, pero con algunas limitaciones en su configuración que fueron identificadas y la propuesta de solución es parte de los objetivos de la presente investigación

CAPÍTULO 2: MATERIALES Y MÉTODOS

En este capítulo se define el área de estudio y el dominio de modelación de la presente investigación. Se muestra el origen y obtención de los datos utilizados, tanto de emisiones como meteorológicos, así como los diferentes procedimientos para su uso en el modelo WRF-Chem, definiendo su configuración en cuanto a parametrizaciones físicas y químicas. Además, se describe la metodología desarrollada para la actualización del inventario de emisiones para obtener una BDE útil para la modelación, Asimismo, se exponen las métricas para la evaluación del desempeño del modelo en el pronóstico, entre otros aspectos de interés.

2.1 Área de estudio

El área de estudio seleccionada para la investigación abarca la región denominada como Centro de México, la cual incluye los territorios pertenecientes a Ciudad de México, Estado de México, Morelos, Hidalgo, Tlaxcala y Puebla (Figura 1).

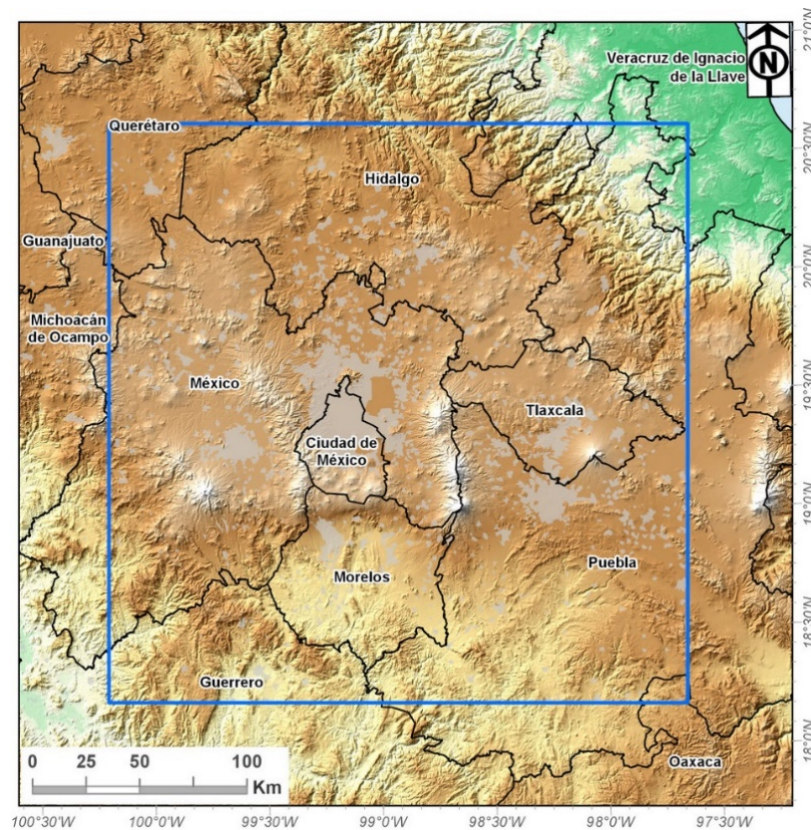


Figura 1 Área de estudio

Dentro de ella, existe especial interés en la ZMVM, una de las zonas más contaminadas del país y más pobladas del mundo con unos 22 millones de habitantes, además de ser la más grande de América Latina con un área aproximada de 7,954 km² y la tercera dentro de las que comprende la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE) en cuanto a su densidad poblacional. Se encuentra en un valle a más de 2200m de altura, lo que, unido a factores geográficos y orográficos, dificultan la dispersión de los agentes contaminantes. Su centro geográfico se localiza en la confluencia del paralelo 19 ° 30 ' de Latitud Norte con el meridiano 99 ° 02 ' de Longitud Oeste.

2.2 Dominio de modelación

Para realizar las simulaciones con WRF-Chem, se construyó un dominio de modelación que abarca el territorio definido como el centro de México, donde se ubicó una malla de 88x88 celdas con resolución de 3km (Figura 2), teniéndose en cuenta 27 niveles verticales. En esta investigación se utiliza el tiempo siempre en hora local.

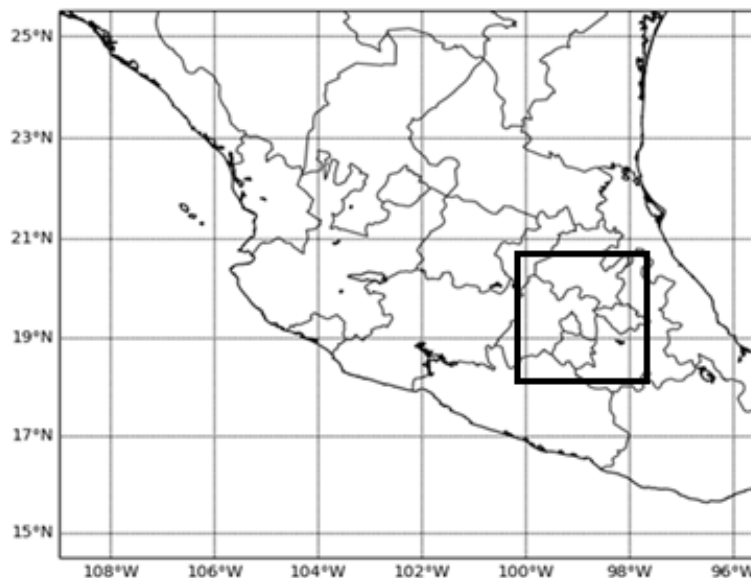


Figura 2 Dominio de modelación

2.3 Configuración del modelo WRF-Chem

En este estudio se empleó como base para el sistema de pronóstico de calidad del aire, el modelo mesoescalar de última generación Weather Research and Forecasting with Chemistry (WRF-Chem, versión 3.9.1.1), capaz de simular las emisiones, transporte, mezcla y transformaciones químicas de los gases traza y aerosoles, de manera acoplada con la meteorología, dentro de un único sistema de coordenadas horizontales y espaciales, sin emplear interpolaciones espacio-temporales, útil para realizar estudios de calidad del aire a escala regional y global (Grell et al. 2005, Fast et al. 2006).

La configuración del modelo en cuanto a parametrizaciones físicas y químicas se muestra en la Tabla 2.

Tabla 2 Parametrizaciones Empleadas en la Modelación con WRF-CHEM

Proceso	Referencia
Capa Límite Planetaria	Yonsei University (YSU, Hong et al. 2006)
Capa Superficial	MM5 Similarity (Zhang y Anthes 1982)
Microfísica	WRF Single-Moment class 5 (WSM5, Hong et al. 2004)
Uso de Suelos	Noah Land-Surface Model (LSM, Chen y Dudhia 2001)
Radiación de Onda Larga	Rapid Radiative Transfer Model (RRTM, Mlawer et al. 1997)
Radiación de Onda Corta	MM5 (Dudhia 1989)
Cúmulos	Kain-Fritsch (Kain y Fritsch 1993, Kain 2004)
Mecanismo Químico	Regional Acid Deposition Model v2 (RADM2, Stockwell et al. 1990)
Interacción	
Aerosoles-Radiación	Activo aer_ra_feedback (Forkel et al. 2012)

Se destaca la utilización del mecanismo Regional Acid Deposition Model versión 2, (RADM2, Stockwell et al., 1990) para la química en fase gaseosa, en el cual, la distribución de las emisiones por especies químicas se determina con base en la reactividad al radical hidroxilo (OH).

RADM2 se emplea comúnmente para el estudio de la generación de O₃, el cual muestra un comportamiento no lineal respecto a las emisiones de monóxido de nitrógeno (NO) y compuestos orgánicos volátiles (COV). Considera un total de 21 especies inorgánicas y 42 orgánicas, las cuales intervienen indistintamente en 29 reacciones químicas inorgánicas (9 de ellas fotoquímicas) y 107 orgánicas (12 de ellas fotoquímicas).

Para las simulaciones de diagnóstico, se utilizó un tiempo de spin-up de 24 h y las salidas del modelo fueron almacenadas cada 1 h para el posterior análisis de las mismas.

2.4 Obtención de datos

Para realizar simulaciones numéricas con el modelo WRF-Chem, es necesario obtener datos de emisiones y meteorológicos imprescindibles para establecer las condiciones iniciales y de frontera, factor determinante en la exactitud de los resultados y de cuya calidad dependerá el desempeño del modelo.

2.4.1 Datos de emisiones. Metodología para la actualización del inventario

En este estudio se utilizó como IE para la modelación, el proporcionado por la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT) en su versión del año 2013 (INEM-2013). Cuenta con la clasificación de emisiones de todas las fuentes fijas, móviles y de área, en sus diferentes categorías, para la ZMVM y México en general. Incluye las emisiones anuales por municipio de los principales contaminantes que afectan la calidad del aire o que son precursores de otros secundarios: SO₂, CO, NO_x, PM₁₀, PM_{2.5}, compuestos orgánicos volátiles (COV), amoníaco (NH₃), entre otros (INECC 2017).

Para obtener una BDE útil para la modelación con WRF-Chem a partir del INEM-2013, con la estructura del archivo de entrada y nombres de variables adecuados y para el periodo de tiempo seleccionado, se le aplicó la metodología correspondiente al modelo DiETE (INECC 2017, García-Reynoso et al. 2018), donde la distribución espacial de las emisiones en cada celda del dominio de modelación se realiza según datos de población, cobertura de suelo y ubicación de industrias. Para fuentes móviles, se considera la fracción de la malla correspondiente a las vialidades y carreteras. Para la distribución temporal se emplean Source Classification Codes (SCC) de la Environment Protection Agency (EPA), con perfiles mensuales, semanales y diarios, por tipo de fuente.

Posteriormente se realiza la especiación de COV para cada tipo de fuente, se distribuyen las emisiones en cada perfil de compuestos químicos emitidos por proceso, lo cual requiere conocer el tipo de proceso, materias primas y condiciones de operación. Debido a que la información es limitada, se utilizan los datos SCC de la EPA. Finalmente, se hace la agrupación según el mecanismo químico empleado (RADM2), que asigna a cada especie química una categoría dependiendo de su reactividad con el radical OH.

Se obtuvieron archivos en formato NetCDF (Rew y Davis 1990) de manera diaria (datos horarios en su interior) con información de la distribución espacial, temporal y química de las emisiones de las especies para el mecanismo químico utilizado, en el dominio de modelación definido.

Sin embargo, al realizar simulaciones numéricas con la BDE obtenida, los resultados del modelo presentaron baja correlación con las mediciones, como se muestra en secciones posteriores. Esto podía preverse, teniendo en cuenta que el IE corresponde a 2013 y la modelación a 2017, pero, además, en su elaboración, se emplean factores de emisión, perfiles temporales y especiación de compuestos orgánicos que no consideran las características del área de interés, sino que provienen de estimaciones de la EPA. Asimismo, la incertidumbre de los datos del IE no está cuantificada ni se reporta en el mismo, por lo que se requieren acciones constantes para su actualización, acorde al caso de estudio que se desee modelar (Hao et al. 2002, Streets et al. 2003, de Foy et al. 2006, Sowden et al. 2008, Keenan et al. 2009, Li et al. 2010, Ying et al. 2012, Trejo 2017).

Teniendo en cuenta lo anterior, se llevó a cabo un proceso de actualización del IE a partir de una metodología descrita en la Figura 3 y similar a la utilizada en trabajos previos (García-Reynoso 2002, Hernández 2006, Urías 2015, Trejo 2017) pero nunca publicada en revistas científicas ni aplicada sobre el área del Centro de México. Consiste en emplear el IE original (INEM-2013) para modelar la calidad del aire y evaluar los resultados de las concentraciones obtenidas respecto a las observaciones, inicialmente para NO_x. Cuando las métricas estadísticas muestren valores en rango aceptable, se procede a comparar los resultados para el caso del O₃, con el objetivo de ir escalando las emisiones de COV en el IE hasta que las métricas indiquen resultados aceptables.

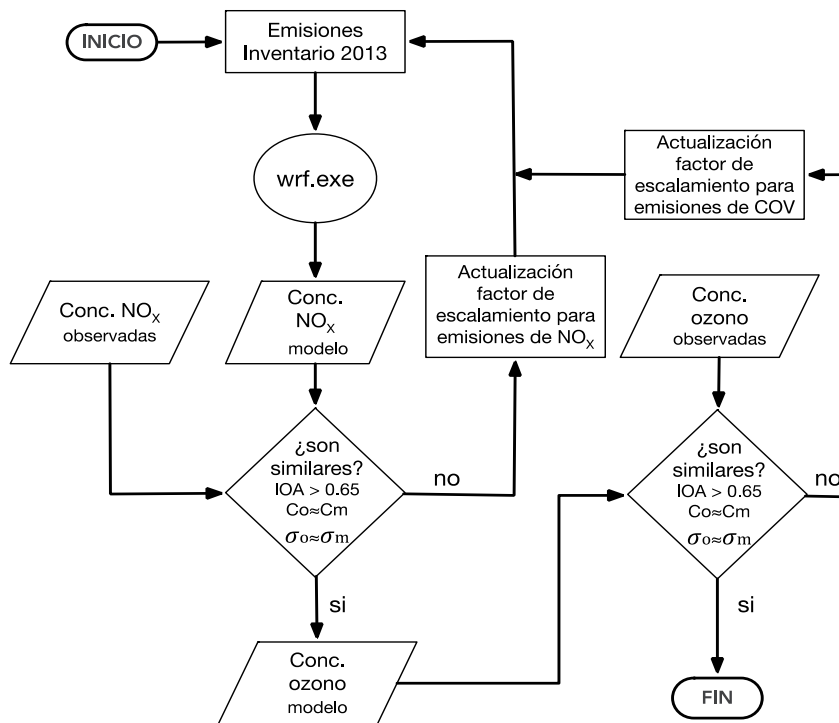


Figura 3 Metodología de ajuste de emisiones en el INEM-2013 mediante modelación con WRF-Chem para la obtención de concentraciones de O₃ similares a las observadas

En esta investigación se realizaron simulaciones numéricas con el modelo considerando los siguientes casos y teniendo en cuenta información: 1) de todas las fuentes de emisión, 2) solo de fuentes fijas, 3) solo de fuentes móviles y 4) solo de fuentes de área. Con la información anterior se formó una ecuación donde el vector de las concentraciones es igual a la matriz de datos multiplicada por el vector de los factores de escalamiento y de esta se obtiene el vector de factores de escalamiento. Este primer resultado se empleó para determinar la contribución de cada tipo de fuente a la concentración total de cada contaminante en la atmósfera y definir un factor de escalamiento para cada uno de ellos, es decir, un valor que permita incrementar o disminuir sus respectivas emisiones en el IE original, para reducir el error.

El primer factor de escalamiento se continúa actualizando mediante la metodología descrita en la Figura 3 hasta obtener un conjunto definitivo de valores, los cuales se muestran en la sección 3.2. De esa forma, se puede obtener una BDE actualizada y útil para modelación de la calidad del aire en el área de estudio.

Se estima que la calibración es eficiente pues los factores de escalamiento determinados a partir de las simulaciones realizadas para el caso de estudio de 2017, mejoran el desempeño del modelo WRF-Chem en el caso de estudio de 2016, o sea, en diferentes períodos de tiempo y condiciones atmosféricas, se obtuvo resultados de las métricas con mayor correlación entre las salidas numéricas y las observaciones (los resultados de ambos casos se presentan en secciones posteriores). Es importante aclarar que el uso de estos factores de escalamiento para actualizar el INEM-2013 permite alcanzar resultados más próximos a los medidos respecto al original, pero podrían variar en dependencia de la temporada del año a modelar, la calidad de los datos meteorológicos y las modificaciones que se realicen a los datos del IE. Lo anterior, con el propósito de obtener resultados con mayor correlación, trabajo de otra investigación en curso.

2.4.2 Datos meteorológicos

Las condiciones iniciales y de frontera de tipo meteorológico empleadas en WRF-Chem, se generaron a partir de los datos obtenidos del Global Forecast System (GFS), desarrollado por National Centers for Environmental Prediction (NCEP). Este brinda información sobre diferentes variables, incluyendo viento, temperatura y densidad del aire, presión, vapor de agua, radiación de onda larga y corta, altura de capas de mezcla, altura geopotencial, entre otras, con resolución espacial de $1^\circ \times 1^\circ$ y temporal de 6 h.

2.5 Periodos de estudio

Para definir los periodos de estudio en la investigación, se consideró la activación del PCAA en la ZMVM para los años 2016 (Tabla 3) y 2017 (Tabla 4). De esta forma, se fijó como primer periodo el comprendido entre el 15 y el 21 de mayo de 2017, el cual se utilizó para realizar las primeras simulaciones con el sistema de modelación propuesto y evaluar sus resultados con las métricas estadísticas correspondientes. De esa manera, se propone un conjunto inicial de factores de ajuste para llevar a cabo la optimización el INEM-2013. En este caso, se comenzaron las simulaciones desde el día 14 de mayo de 2017 para permitir que el modelo alcance su estabilidad. Posteriormente, se definió el segundo periodo de estudio, entre el 14 y el 17 de marzo de 2016, para validar los factores de escalamiento obtenidos y obtener la BDE final que sería utilizada para realizar el pronóstico de calidad de aire con WRF-Chem en el Centro de México.

Tabla 3 Activación del programa para contingencias ambientales Atmosféricas (PCAA) en la ZMVM en el año 2016

Contaminante	Valor IMECA	Fecha y Hora Activación	Valor MECA	Fecha y Hora Máximo	Valor IMECA	Fecha y Hora Desactivación
PM₁₀	153	6-ene (09:00)	172	6-ene (11:00)	132	7-ene (09:00)
O₃	151	15-may (16:00)	186	20-may (17:00)	104	21-may (19:00)
O₃	162	22-may (15:00)	183	23-may (18:00)	105	24-may (18:00)
PM₁₀	154	14-dic (11:00)	162	14-dic (14:00)	147	15-dic (09:00)

Tabla 4 Activación del programa para contingencias ambientales atmosféricas (PCAA) en la ZMVM en el año 2017

Contaminante	Valor IMECA	Fecha y Hora Activación	Valor IMECA	Fecha y Hora Máximo	Valor IMECA	Fecha y Hora Desactivación
O₃	194	14-mar (16:00)	203	14-mar (17:00)	136	17-mar (16:00)
O₃	156	05-abr (17:00)	156	05-abr (17:00)	127	06-abr (17:00)
O₃	161	02-may (15:00)	192	04-may (16:00)	127	05-may (17:00)
O₃	157	14-may (17:00)	157	14-may (17:00)	69	15-may (15:00)
O₃	178	20-may (15:00)	188	20-may (16:00)	133	21-may (17:00)
O₃	151	24-may (15:00)	151	24-may (15:00)	49	24-may (21:00)
O₃	165	27-may (15:00)	165	27-may (15:00)	109	28-may (18:00)
O₃	155	31-may (16:00)	161	31-may (16:00)	115	01-jun (18:00)
O₃	152	08-jul (17:00)	152	08-jul (17:00)	88	09-jul (15:00)
O₃	151	11-ago (16:00)	158	11-ago (17:00)	127	12-ago (17:00)

Una vez establecida la configuración del sistema, se realiza la evaluación del desempeño durante dos años consecutivos, 2018 y 2019, para el pronóstico de las concentraciones de O₃ y otros contaminantes, en plazos de 24h, 48h y 72 horas.

2.5.1 Descripción de los periodos de estudio

En el primer periodo de estudio, se produjo un episodio de alta contaminación por O₃, iniciado el 15 de mayo de 2017, cuando a las 16:00 horas se marcó un valor del Índice Metropolitano de la Calidad del Aire (IMECA) de 151 en la estación Ajusco Medio (AJM), sinónimo de muy mala calidad del aire, alcanzándose un máximo de 186 el día 20 de mayo (17:00 horas) en AJM. Las concentraciones horarias de O₃ (Figura 4) llegaron a cifras cercanas a 180 ppb en varias estaciones de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico (RAMA), muy altas y dañinas para la salud, superando considerablemente la norma mexicana NOM-020-SSA1-2014 (SSA 2014) de 95 ppb en cada uno de los siete días que duró la contingencia ambiental, la más prolongada desde que se aplica el PCAA en 1992.

Este evento estuvo relacionado a la presencia de un sistema de alta presión sobre la zona de estudio, que propició condiciones de estabilidad atmosférica muy favorables para la formación y acumulación de O₃, adversas para la dispersión de sus precursores, esto es, fuerte radiación solar, vientos débiles, altas temperaturas, escasas lluvias y limitado transporte de humedad (SEMARNAT 2017).

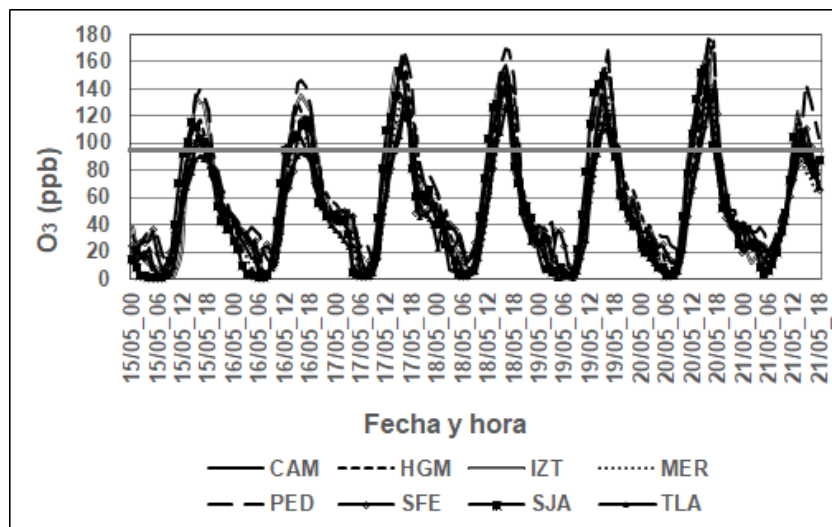


Figura 4 Series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017). Se señala el valor de la NOM-020-SSA1-2014 en 95 ppb

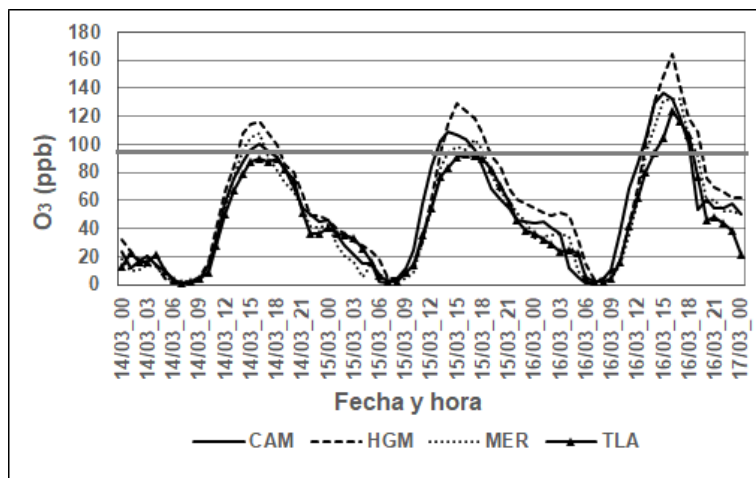


Figura 5 Series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016). Se señala el valor de la NOM-020-SSA1-2014 en 95 ppb

En cuanto al periodo de evaluación del sistema de pronóstico, los años 2018 y 2019, presentaron un comportamiento diferente. Según SEDEMA (2018), las condiciones meteorológicas de 2018 fueron favorables para la dispersión de los contaminantes durante gran parte del año, principalmente entre marzo y mayo, en temporada de O₃. Los niveles de concentración de SO₂, CO y NO_x, mostraron una disminución del 3% con respecto a 2017, en la ZMVM. En el caso del O₃, aunque se superó la norma de 95 ppb en 210 días, sus concentraciones máximas registraron valores bajos en comparación con otros años y se consideró como moderadamente limpio, similar a lo ocurrido en 2012. Además, en 276 días el índice IMECA reportó valores que situaban la calidad del aire en la ZMVN en categorías de Mala y Muy Mala, activándose el PCAA en dos ocasiones: el 6 de junio para O₃ y el 25 de diciembre para PM₁₀.

En cuanto al año 2019, según INECC (2020), el número de días con concentraciones superiores al límite de 24 horas para las partículas disminuyó hasta un 37% del total anual para PM₁₀ y 8% para PM_{2.5}, mientras que, para el O₃, también se vio una reducción a 59% de los días naturales del año. Sin embargo, subió a 279 el número de días con mala o muy mala calidad del aire en la zona y se activó el PCAA en seis ocasiones, cuatro de ellas por O₃ (30 de marzo, 10 de abril, 16 de abril y 14 de mayo), dos por PM_{2.5} (14 de mayo y 25 de diciembre) y una por PM₁₀ (1ro de enero). En cuanto a CO, NO_x y SO₂, se mantuvo la ZMVM sin superar las normas establecidas desde hace una década.

2.6 Proceso de simulación numérica con el sistema de pronóstico

El sistema de pronóstico se realiza empleando un conjunto programas auxiliares escritos en *bash*, los cuales fueron desarrollado durante la presente investigación y se ejecutan a diario para realizar las siguientes acciones:

- 1- El programa auxiliar que controla el pronóstico, *do_proceso00z.sh*, se inicia a las 4:00 am de cada día.
- 2- Se generan las emisiones para el día de ejecución y los dos subsecuentes, utilizando el sistema DiETE, mediante el programa *ecacor.sh*
- 3- Se descargan los datos de meteorología globales que incluyen el día actual y dos subsecuentes hacia el futuro (72 horas de corrida), lo cual se realiza mediante el programa auxiliar *baja_datos.sh*
- 4- Se procesan los datos para el dominio de modelación utilizando *do_wps.sh*
- 5- Se realiza la interpolación en la vertical para el período de tiempo seleccionado a través del programa *do_real.sh*
- 6- Una vez que se tienen los datos de meteorología y de las emisiones, se ejecuta el *wrf.exe* mediante *do_wrf.sh*.
- 7- Se procesan las salidas del modelo para generar las imágenes con el programa *do_ARWpost.sh*.
- 8- Se envían las imágenes obtenidas al servidor web en dónde se despliegan en la página web a través del *do_grapichs.sh*
- 9- Se mueven las salidas del directorio del pronóstico al sistema de almacenamiento, línea final del programa auxiliar *do_graphics.sh*.

El tiempo necesario para descargar los datos varía de 15 a 40 min; el procesamiento de emisiones alrededor de 8 min; el sistema de preprocesamiento del modelo WRF-Chem (WPS) y el ejecutable *real.exe* utilizan entre ambos unos 10 min; la ejecución del *wrf.exe* emplea alrededor de 2.25 horas, mientras que el *do_ARWpost.sh* requiere de 8 min y el *do_graphics.sh* emplea 6 min. En total, todo el proceso se realiza en un tiempo estimado de 3 a 3.45 horas y se obtienen salidas numéricas para distintos contaminantes atmosféricos sobre el área de estudios para plazos de pronóstico de 24, 48 y 72 horas.

La operación diaria se realiza con un *crontab* (proceso que ejecuta automáticamente algunas tareas y trabajos según el tiempo programado), donde se llama el código base (*do_proceso00z.sh*) y en cada programa auxiliar se generan registros para identificar en qué parte del proceso se presentó algún problema, si fuere el caso.

En la Figura 6 se muestra un diagrama de flujo con todo el proceso descrito anteriormente

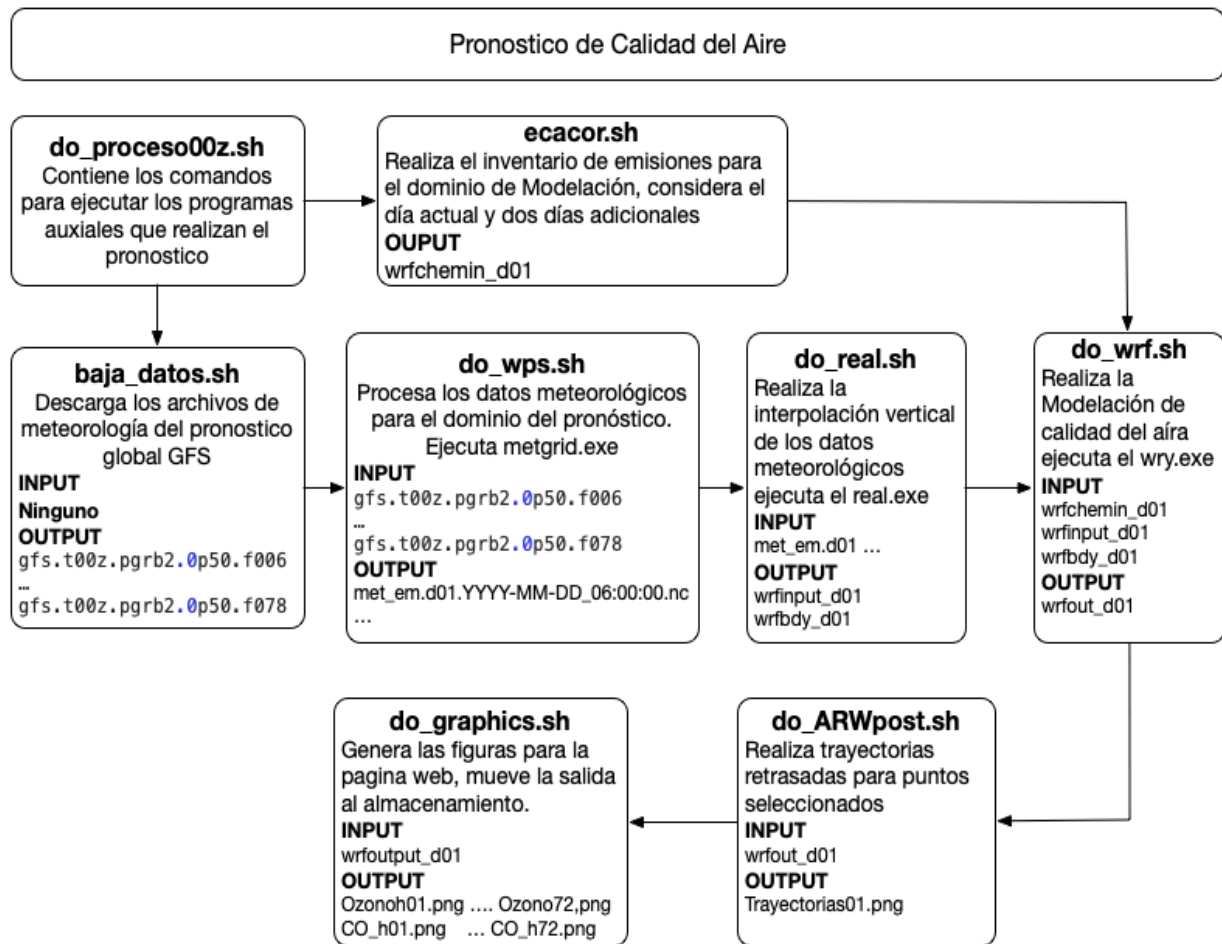


Figura 6 Proceso de funcionamiento del sistema de pronóstico de calidad del aire con WRF-Chem

2.7 Evaluación de desempeño del modelo WRF-Chem y el sistema de pronóstico

Para evaluar, de modo general, el desempeño del modelo WRF-Chem y el sistema de pronóstico, se compararon los valores obtenidos en las simulaciones numéricas con mediciones de las estaciones de la RAMA disponibles en los períodos de tiempo seleccionados, siempre que hubieran registrado al menos el 75 % de las observaciones correspondientes. De ellas, se seleccionaron las que tuvieran el 100 % de los valores registrados en cada caso como muestra de los análisis estadísticos realizados, quedando las estaciones CAM (Camarones), HGM (Hospital General de México), IZT (Iztacalco), MER (Merced), PED (Pedregal), SFE (Santa Fe), SJA (San Juan de Aragón) y TLA (Tlalnepantla) para el caso de 2017 y CAM, HGM, MER y TLA para 2016. La Figura muestra la ubicación de estas en el área de estudio.

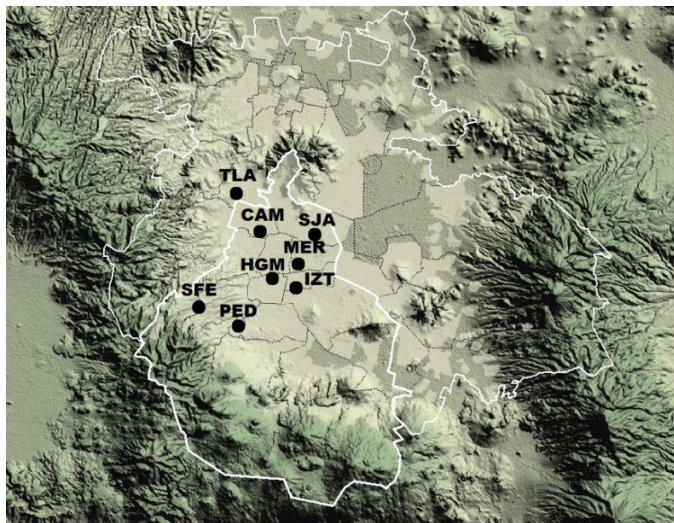


Figura 7 Distribución de las estaciones de la RAMA consideradas sobre el área de estudio

Los archivos de salida del modelo y los datos de estaciones se analizaron con el Model Evaluation Tools (MET versión 5.0), empleándose la metodología de verificación de celda-punto (Pielke 1984). Aquí, se emparejan los valores numéricos que se extraen de las celdas del dominio del modelo, correspondientes a la ubicación de las estaciones de monitoreo, con los datos horarios de los contaminantes atmosféricos que fueron medidos en las mismas. Luego, se calcularon algunas métricas estadísticas muy utilizadas para evaluar cuantitativamente el desempeño del modelo de forma discreta y su error respecto a las mediciones, las cuales se muestran en la Tabla 5.

Tabla 5 Definición de las métricas estadísticas empleadas para evaluar el desempeño del modelo WRF-Chem

Métricas	Definición
Media de los valores observados ($\overline{C_o}$)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_o^i$
Media de los valores modelados ($\overline{C_m}$)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_m^i$
Desviación estándar de los valores observados (σ_o)	$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_o^i - \overline{C_o})^2}$
Desviación estándar de los valores modelados (σ_m)	$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - \overline{C_m})^2}$
Bias Medio (MB)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - C_o^i)$
Error Medio (ME)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_m^i - C_o^i $
Bias Medio Normalizado (NMB), %	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(C_m^i - C_o^i)}{C_o^i}$
Error Medio Normalizado (NME), %	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{ C_m^i - C_o^i }{C_o^i}$
Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE)	$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - C_o^i)^2}$
Coefficiente de Correlación (ρ)	$\frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - \overline{C_m})(C_o^i - \overline{C_o})}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - \overline{C_m})^2} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_o^i - \overline{C_o})^2}}$
Índice de Concordancia (IOA)	$1 - \frac{\sum_{i=1}^N (C_m^i - C_o^i)^2}{\sum_{i=1}^N (C_m^i - \overline{C_o} + C_o^i - \overline{C_m})^2}$

N: número de observaciones, C_m^i : valores modelados y C_o^i : valores observados

Lo más favorable sería que la media de los valores modelados ($\overline{C_m}$) se aproxime a la de los valores observados ($\overline{C_o}$) y lo mismo para sus desviaciones estándar (σ_o y σ_m); el Bias Medio (MB), el Error Medio (ME) y la Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE) muestren valores cercanos a 0 y el Bias Medio Normalizado (NMB) y el Error Medio Normalizado (NME) a 0 %; mientras que el Coeficiente de Correlación (ρ) y el Índice de Concordancia (IOA) presenten valores próximos a 1 (Pielke 1984, Willmott 1981 y Willmott et al. 1985).

Las variables meteorológicas analizadas en este trabajo son: temperatura superficial (T_2), humedad relativa (HR) y velocidad del viento (VV) y los contaminantes: O_3 , NO, NO_2 , CO y SO_2 , con énfasis en O_3 , principal causa de episodios de alta contaminación en el área de estudio.

Precisamente, relacionado con el pronóstico del O_3 , se determinan algunos criterios de calidad del mismo a partir de rangos establecidos para las métricas estadísticas definidas anteriormente, según fuentes bibliográficas consultadas, tales como Pay et. al. (2010) y Baldasano et al. (2011). De esta forma, se definen cinco categorías para evaluar el pronóstico: Muy Bueno (MB), Bueno (B), Aceptable (A), Malo (M) y Muy Malo (MM), cuyas cifras límites se muestran en la Figura 8.

Contaminante	Bias ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) $MB = 0^*$	r - $r = 1^*$	RMSE ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) $RMSE = 0^*$	
O_3	Muy Bueno (MB)	$ MB < 5$	$r > 0.70$	$RMSE < 10$
	Bueno (B)	$5 \leq MB < 10$	$0.50 < r \leq 0.70$	$10 \leq RMSE < 20$
	Aceptable (A)	$10 \leq MB < 20$	$0.30 < r \leq 0.50$	$20 \leq RMSE < 30$
	Malo (M)	$20 \leq MB < 30$	$0.10 < r \leq 0.30$	$30 \leq RMSE < 40$
	Muy Malo (MM)	$ MB \geq 30$	$r \leq 0.10$	$RMSE \geq 30$

Figura 8 Criterios de calidad para la evaluación del sistema de pronóstico definidos en función de las métricas estadísticas

Considerando que un sistema de pronóstico es una herramienta eficiente y confiable si puede predecir la concentración de una variable para umbrales específicos, es preciso realizar una evaluación categórica de su desempeño (Grell et al., 2005; Chai et al., 2013; Zabkar et al., 2015).

En el caso del O_3 , existe un valor de 95 ppb que indica el límite máximo permisible en México para su concentración en 1h y otro en 155 ppb, umbral para activar la Fase I del PCAA en la ZMVM, siendo 125 ppb el punto medio entre ambas cifras. Precisamente, para la evaluación categórica, se definen estos valores de 95 ppb y 125 ppb como los umbrales, dividiendo el análisis en 4 cuadrantes:

- A: El pronóstico es superior al límite de excedencia, pero la observación es inferior (Falsa alarma).
- B: El pronóstico y la observación son superiores al límite de excedencia
- C: El pronóstico y la observación están por debajo del límite de excedencia.
- D: El pronóstico es inferior al límite de excedencia, pero la observación es superior.

El número de puntos situados en cada cuadrante se definen como N_A , N_B , N_C y N_D y se calculan los siguientes parámetros (Grell et al., 2005):

- **Precisión (PS):** fracción de puntos cuyo valor observado es inferior o superior al límite de excedencia y es pronosticado correctamente (B y C). Valora la habilidad de predicción del modelo de forma crítica. Se calcula: $\frac{(N_B+N_C)}{(N_A+N_B+N_C+N_D)}$.
- **Probabilidad de detección (PD):** fracción de puntos cuyos valores observados son superiores al límite de excedencia (B y D) y son pronosticados correctamente (D). Se calcula $\frac{(N_D)}{(N_B+N_D)}$.
- **Tasa de falsa alarma (TFA):** fracción de puntos cuyos valores pronosticados son superiores al límite de excedencia (A y B) y están erróneos (A). Se calcula $\frac{(N_A)}{(N_A+N_B)}$.
- **Índice de éxito crítico (IEC):** fracción de puntos cuyos valores pronosticados son correctos y superiores al límite de excedencia (B), respecto al total de puntos cuyas observaciones y pronósticos son superiores al límite de excedencia (A, B y D). Se calcula $\frac{(N_B)}{(N_A+N_B+N_D)}$

CAPITULO 3: RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1 Desempeño del modelo WRF-Chem empleando el INEM-2013 original

A continuación, se presentan los resultados obtenidos de la modelación con WRF-Chem en el período del 15 de mayo de 2017 a las 00 horas hasta el 21 de mayo de 2017 a las 18 horas, a partir de la BDE inicial con la cual se contaba para las simulaciones, obtenida del INEM-2013.

En la Tabla 6 aparecen valores de las métricas estadísticas calculadas para las variables meteorológicas y químicas consideradas, siendo el valor mostrado en cada caso el promedio del conjunto de todas las estaciones disponibles. Se aprecia que para la Temperatura (T_2), la Humedad Relativa (HR) y la Velocidad del Viento (VV), los resultados son, en general, similares a los observados, sobre todo para T_2 , cuyos valores de IOA y ρ son superiores a 0.90, mientras que para HR y VV superan a 0.60. El modelo tiende a subestimar las observaciones de los parámetros meteorológicos, sobre todo HR, cuyo MB es de -12.96 y NMB de -18.45 %. Tanto RMSE como ME para T_2 y VV son acordes con las escalas de las variables.

Sin embargo, para los contaminantes analizados, el desempeño del modelo es muy poco satisfactorio. Con excepción del O_3 (IOA= 0.54 y ρ = 0.54, igual ambos por debajo de lo aceptable), en el resto de las variables IOA y ρ presentan valores inferiores a 0.45, llegando a cifras mínimas respectivas de 0.08 y 0.16 para NO_2 . Además, las simulaciones sobrestiman considerablemente las concentraciones de NO_2 y NO, principalmente, dados los valores elevados de MB para ambas variables y sustentado por NMB y NME, que sobrepasan el 700% para NO_2 . En el caso de CO, el modelo subestima las observaciones, dado por MB = -81.76 y consolidado por NMB = -14.12 %. Las cifras muy altas de RMSE y ME para NO_2 , NO y CO indican igualmente que el error que comete el modelo respecto a las observaciones es considerable. Por su parte, los valores de los estadísticos para SO_2 , con RMSE = 8.66, ME = 5.19, IOA = 0.27 y ρ = 0.21, están fuera de lo aceptable dada la escala de esta variable.

Tabla 6 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación para las variables meteorológicas y contaminantes analizados (15 al 21 de mayo de 2017, INEM-2013 original)

	T ₂	HR	VV	O ₃	NO ₂	NO	CO	SO ₂
$\overline{C_o}$	21.26	47.15	2.23	54.19	27.28	12.21	668.57	3.96
$\overline{C_m}$	18.71	34.21	2.03	39.03	228.08	271.67	589.42	6.43
σ_o	4.65	17.01	1.09	39.49	13.58	26.39	359.19	4.95
σ_m	4.86	8.56	1.61	9.13	265.45	384.48	801.69	6.78
MB	-2.58	-12.96	-0.08	-15.17	200.81	257.79	-81.76	2.47
ME	2.77	16.34	1.12	27.68	201.12	258.76	525.72	5.19
NMB	-1.34 %	-18.45 %	-0.81 %	-5.34 %	726.14 %	34.22 %	-14.12 %	3.45 %
NME	1.54 %	32.23 %	13.12 %	10.45 %	728.56 %	34.24 %	47.85 %	3.51 %
RMSE	3.23	20.34	1.54	35.89	328.87	456.89	773.51	8.66
ρ	0.93	0.71	0.60	0.59	0.16	0.19	0.31	0.21
IOA	0.92	0.68	0.64	0.54	0.08	0.09	0.44	0.27

Para reafirmar el rendimiento poco satisfactorio del WRF-Chem en la descripción del comportamiento de las variables químicas analizadas, se muestran las Figuras 9, 10 y 11, todas para el caso de O₃ a modo de ejemplo, donde aparecen la serie de tiempo de las concentraciones horarias de todo el conjunto de estaciones de la RAMA consideradas y sus respectivas simulaciones (Figura 9), las series de tiempo para las concentraciones horarias máximas y medias (Figura 10), así como el diagrama de dispersión para todas las concentraciones horarias (Figura 11).

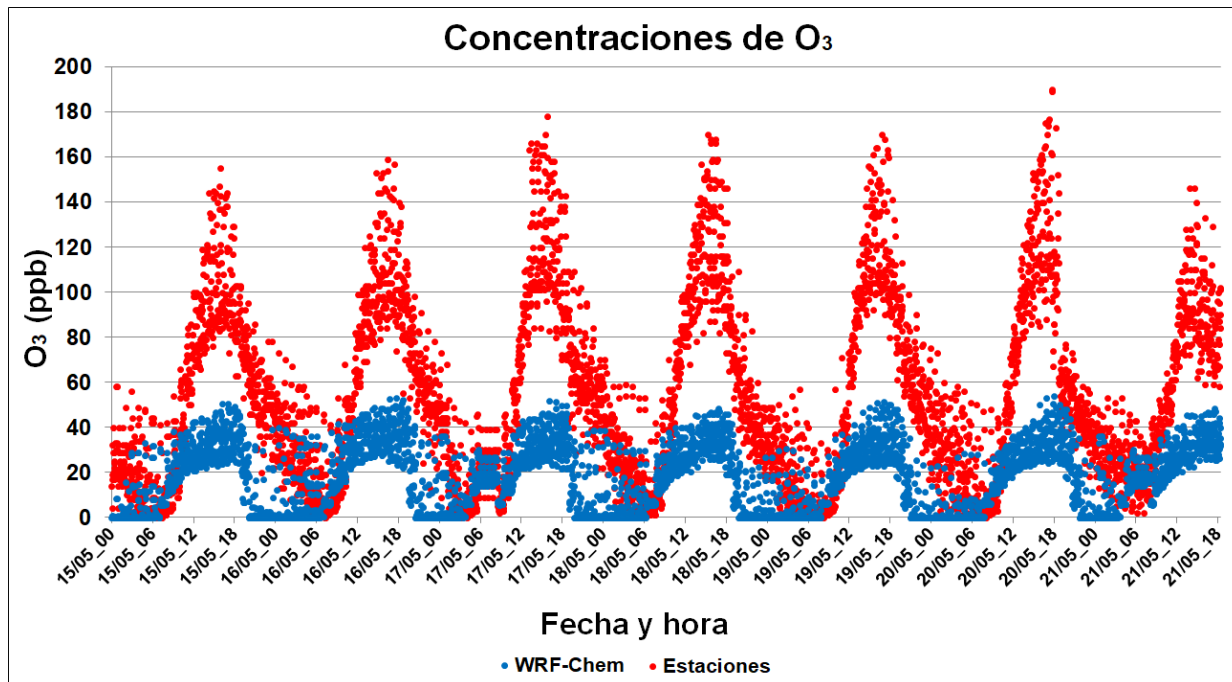


Figura 9 Series de tiempo de todas las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 original) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)

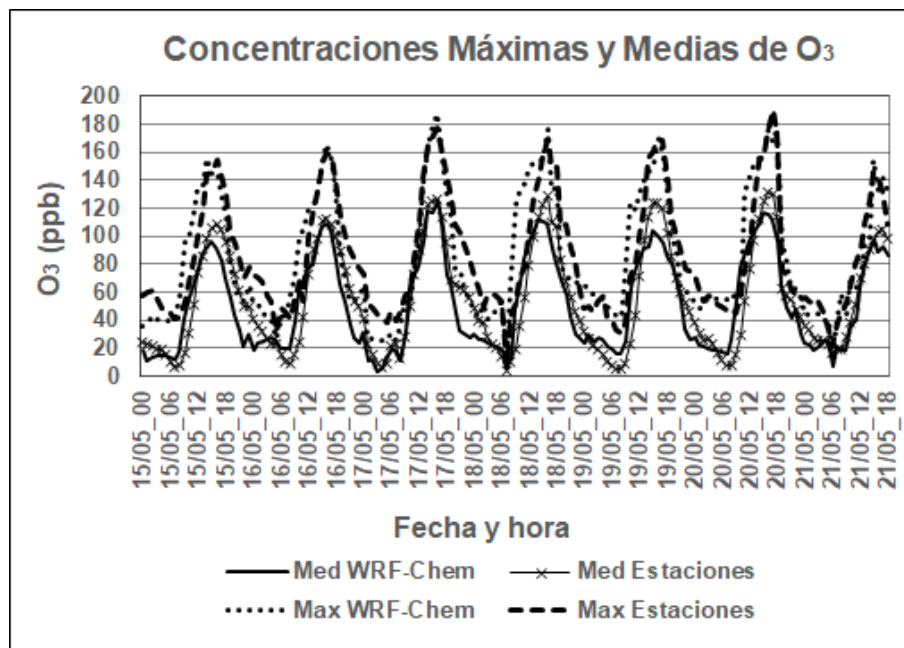


Figura 10 Series de tiempo de las concentraciones máximas y medias horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 original) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)

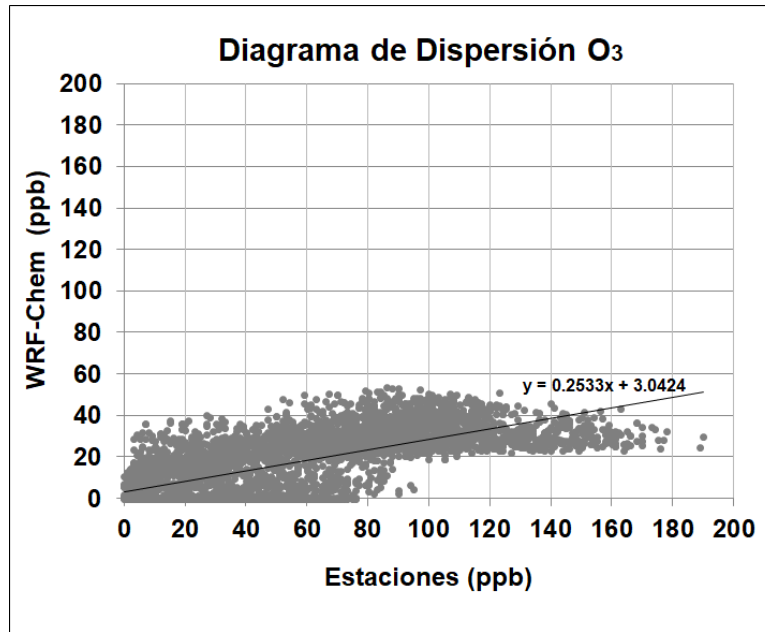


Figura 11 Diagrama de dispersión para las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 original) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)

En general, se puede apreciar que el modelo, aunque simula de cierta forma el ciclo diario de O₃ en el área de estudio, no describe adecuadamente la distribución temporal de la variable en sus valores puntuales y medios, subestimando considerablemente las observaciones, sobre todo en sus picos máximos, mostrando cifras que no sobrepasan las concentraciones de fondo.

Los resultados anteriores confirman que el INEM-2013 original no es adecuado para elaborar una BDE útil para la modelación de la calidad del aire en el área de estudio. Debe destacarse, que la calidad del IE es determinante para la simulación de las concentraciones de los contaminantes atmosféricos con mejor precisión respecto a las observaciones y en menor medida influye también en el comportamiento de las variables meteorológicas. Lo anterior, debido a que el modelo WRF-Chem emplea un mecanismo que considera la interacción aerosoles-radiación para incluir el efecto de las emisiones en la meteorología. En ese caso, las emisiones de COV generan aerosoles orgánicos secundarios que influyen en la radiación solar que llega a la superficie, modificando la temperatura superficial y con ello otras variables meteorológicas calculadas por el modelo (Forkel et al. 2012).

3.2 Obtención de factores de escalamiento. Condiciones iniciales a partir del INEM-2013 optimizado

Luego de aplicar la metodología descrita en la Figura 5 y realizar múltiples experimentos, se obtuvo un conjunto de factores de escalamiento para realizar el ajuste al INEM-2013 (Tabla 7). Se observa, en general, que para las fuentes de área se propone aumentar 2.6 veces las emisiones de CO y 1.25 veces las de SO₂, así como reducir entre 80 y 90% las emisiones de NO y NO₂. Para las fuentes móviles, disminuir aproximadamente a la mitad las emisiones de CO y NO₂, así como en 15% y 90% las de SO₂ y NO, respectivamente. En el caso de las fuentes puntuales, los factores de escalamiento indican que es preciso aumentar 1.2 veces las emisiones de NO y bajar entre 40 y 50% las de NO₂, CO y SO₂. Para todos los casos, los COV se deben incrementar 2.5 veces.

Tabla 7 Factores de escalamiento obtenidos por contaminante y tipo de fuente

Contaminante	Área	Móvil	Puntual
NO	0.180	0.100	1.200
NO₂	0.100	0.530	0.400
CO	2.600	0.500	0.500
SO₂	1.250	0.850	0.400
COV	2.500	2.500	2.500

En la Figura 12 se muestra, a modo de ejemplo, las distribuciones espaciales de las emisiones de CO y NO obtenidas en el dominio de modelación a partir del INEM-2013 actualizado, para el 15 de mayo de 2017 a las 03:00 y a las 18:00 horas, momentos del día en que se registran, como promedio, los valores mínimos y máximos de estas variables, debido principalmente al aumento o disminución del tráfico vehicular (Zhang et al. 2009). Las emisiones más elevadas en ambos contaminantes se observan hacia la ZMVM y en el horario de la tarde.

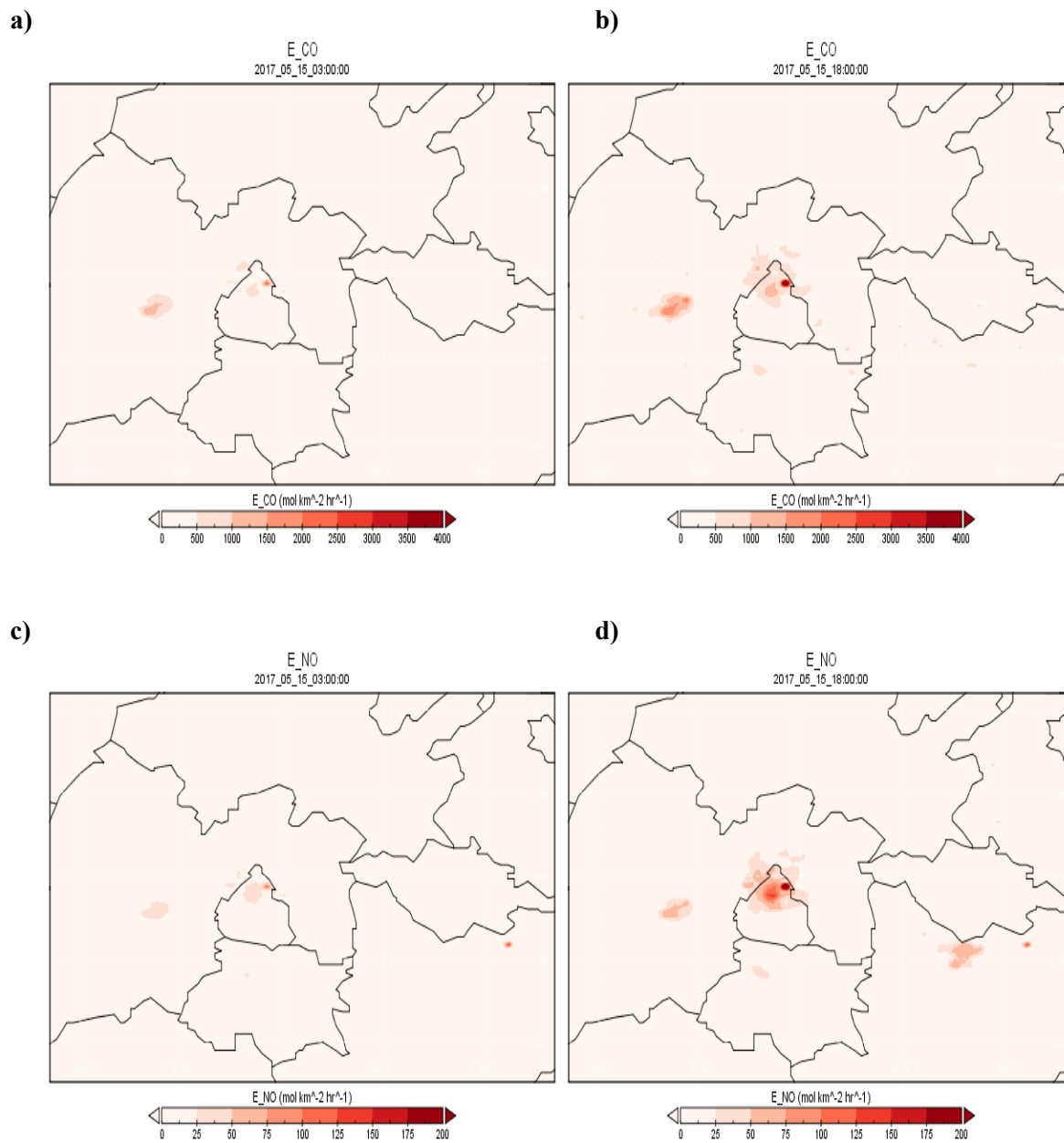


Figura 12 Distribución espacial de las emisiones de a) y b) CO y c) y d) NO obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (15 de mayo de 2017, 03:00 y 18:00 horas)

A modo de complemento, se presenta en la Figura 13 la serie de tiempo de emisiones de CO y NO entre el 15 y 21 de mayo de 2017, para un sitio dentro del dominio de modelación, en la ZMVM. Se observan los comportamientos característicos de las emisiones de cada uno de los contaminantes según las horas del día (Zhang et al. 2009)

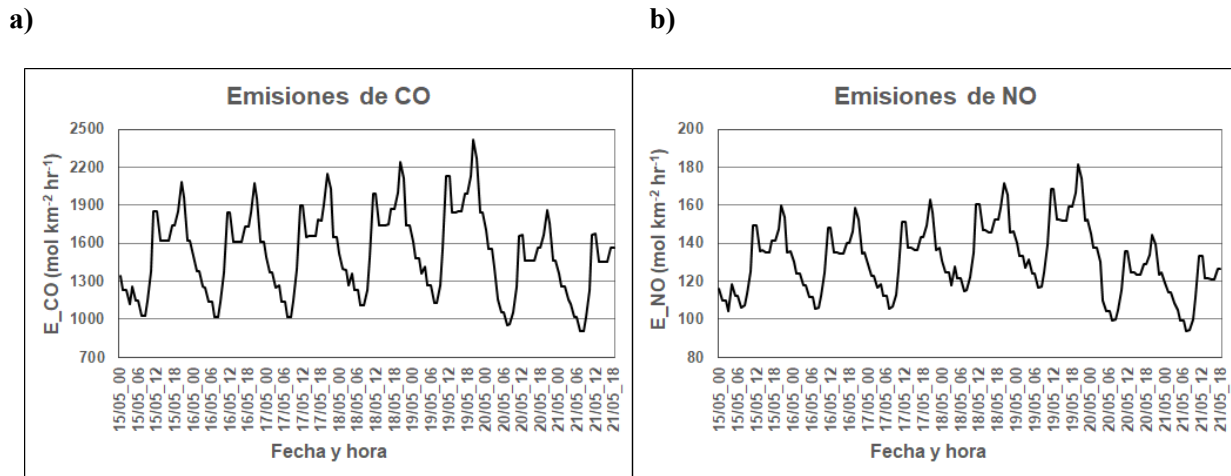


Figura 13 Series de tiempo de las emisiones de a) CO y b) NO obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (15 al 21 de mayo de 2017) para un sitio de la ZMVM

A partir de la base de datos que se obtuvo, modificando el INEM-2013 original, empleando los factores de escalamiento obtenidos, se realizaron las simulaciones numéricas con el modelo WRF-Chem. Considerar aquí que las emisiones biogénicas se obtuvieron a partir del modelo MEGAN2 (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature, Guenther et al., 1994 y 2006).

3.3 Desempeño del modelo WRF-Chem empleando el INEM-2013 optimizado

A continuación, se presentan los resultados obtenidos de la modelación con WRF-Chem para el mismo periodo del 15 al 21 de mayo de 2017, pero empleando la BDE actualizada que se obtuvo de aplicar los factores de escalamiento definidos en la Tabla 6 al INEM-2013.

En el Tabla 8 se muestran los valores de las métricas estadísticas calculadas para las variables meteorológicas y contaminantes seleccionados, apreciándose que mismas indican una mejora de forma cuantitativa con respecto a la simulación inicial.

Tabla 8 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación para las variables meteorológicas y contaminantes analizados (15 al 21 de mayo de 2017, INEM-2013 actualizado)

	T ₂	HR	VV	O ₃	NO ₂	NO	CO	SO ₂
$\overline{C_o}$	21.26	47.15	2.23	54.19	27.28	12.21	668.57	3.96
$\overline{C_m}$	19.06	41.76	2.14	51.26	38.76	28.79	681.42	5.31
σ_o	4.65	17.01	1.09	39.49	13.58	26.39	359.19	4.95
σ_m	4.73	12.09	1.46	26.75	28.13	34.14	417.06	5.47
MB	-2.39	-7.36	-0.06	-3.89	13.24	18.06	61.35	1.89
ME	2.43	10.94	1.04	11.65	27.36	31.67	72.68	3.66
NMB	-1.23 %	-14.62 %	-0.81 %	-0.34 %	25.02 %	27.19 %	13.61 %	2.49 %
NME	1.41 %	21.53 %	11.68 %	6.81 %	29.68 %	26.71 %	29.94 %	2.60 %
RMSE	3.16	15.08	1.27	19.36	31.03	29.52	36.19	5.17
ρ	0.94	0.74	0.73	0.86	0.75	0.76	0.71	0.65
IOA	0.94	0.76	0.70	0.88	0.78	0.74	0.73	0.66

En todos los casos los valores medios modelados son muy cercanos a los observados dentro de un rango del 15% de diferencia máxima para las variables meteorológicas y el O₃, algo superiores para el resto de los contaminantes, pero siempre aceptables. El modelo continúa subestimando ligeramente las observaciones en el caso de T₂, VV y O₃ y hasta en un 14.62% para el caso de HR (cifra que aún se considera satisfactoria), sobrestimándolas en el resto de las variables, sobre todo CO que presenta MB = 61.35, mientras que NO₂ y NO tienen NMB y NME superiores a 25%, MB de 13.24 y 18.06, respectivamente, así como ME > 25.00, lo cual las convierte en las variables con resultados menos favorables, pero dentro del intervalo aceptable menor al 30%. Aquí es válido señalar que con los métodos actuales de medición de NO₂ pueden registrarse valores de contaminantes superiores al 20% del valor real.

Los coeficientes IOA y ρ son mayores a 0.70 para todas las variables meteorológicas, llegando a idénticos 0.94 en el caso de T_2 . Sus valores de RMSE, son muy bajos, casi insignificantes para T_2 y VV, al igual que el SO_2 del lado de los contaminantes, los cuales, en general, presentan valores de IOA y ρ superiores a 0.65, destacándose el O_3 con coeficientes respectivos que ascienden a 0.88 y 0.86. En ninguno de los casos la métrica NME supera el 30%, por lo que se considera que el modelo tiene muy buen rendimiento y reduce sus errores con respecto a las observaciones.

En la Figura 14 se muestran las series de tiempo de las concentraciones horarias de O_3 de todo el conjunto de estaciones consideradas con sus correspondientes pares simulados, mientras que en las Figuras 15 y 16 aparecen, respectivamente, para las concentraciones medias y máximas horarias.

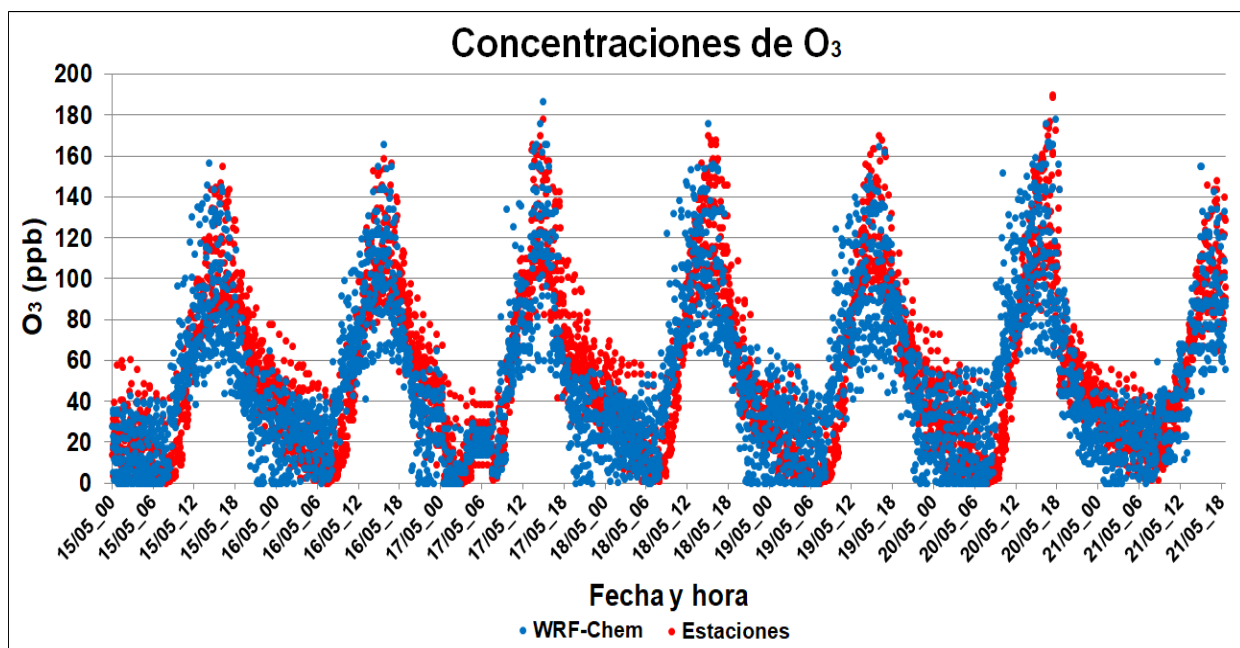


Figura 14 Series de tiempo de todas las concentraciones horarias de O_3 modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)

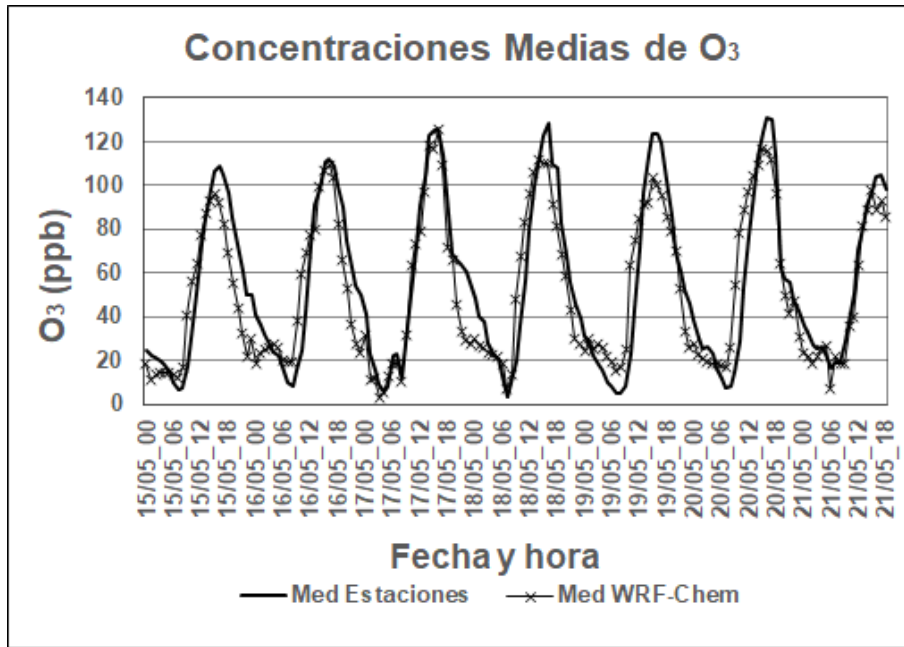


Figura 15 Series de tiempo de las concentraciones medias horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)

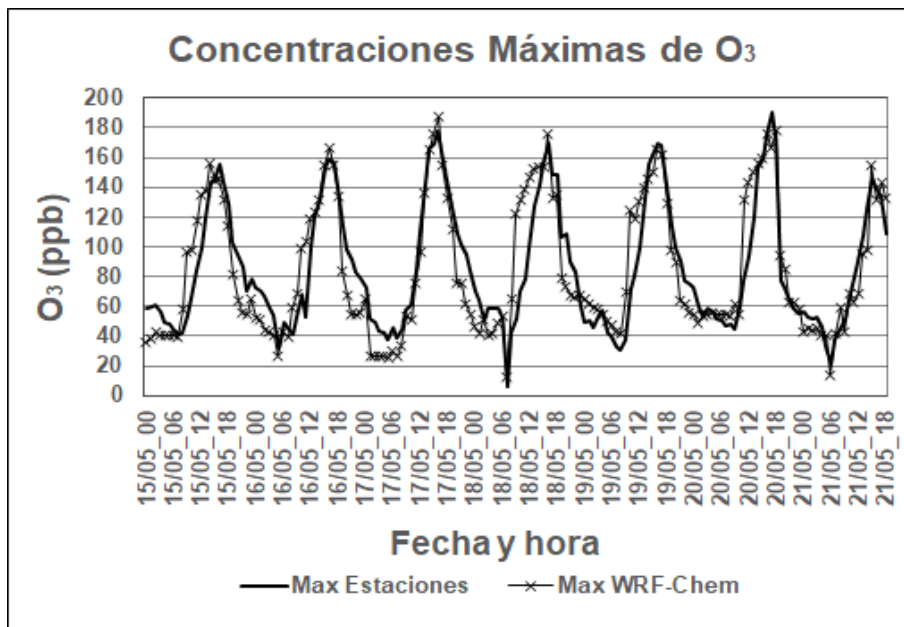


Figura 16 Series de tiempo de las concentraciones máximas horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)

De ambas se puede señalar que el modelo describe la distribución temporal de la variable de forma satisfactoria, en términos de su ciclo diario, ampliamente estudiado y comprobado en investigaciones anteriores (Tie et al. 2007 y Stephens et al. 2008), aunque con un ligero desfase. Es capaz de simular los valores medios de la variable y sus picos diarios de concentraciones máximas en correspondencia con las observaciones, lo cual se confirma tanto en el diagrama de dispersión de la Figura 17 como en la Figura 18, donde se muestra un resumen del porcentaje de casos, observados y modelados, que se encuentran en cada uno de los diferentes rangos definidos para las concentraciones horarias de O₃.

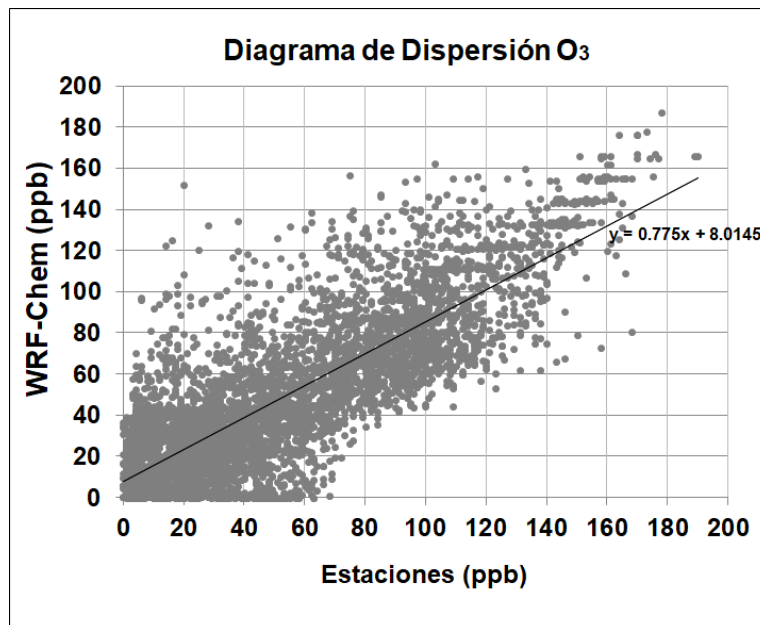


Figura 17 Diagrama de dispersión para las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)

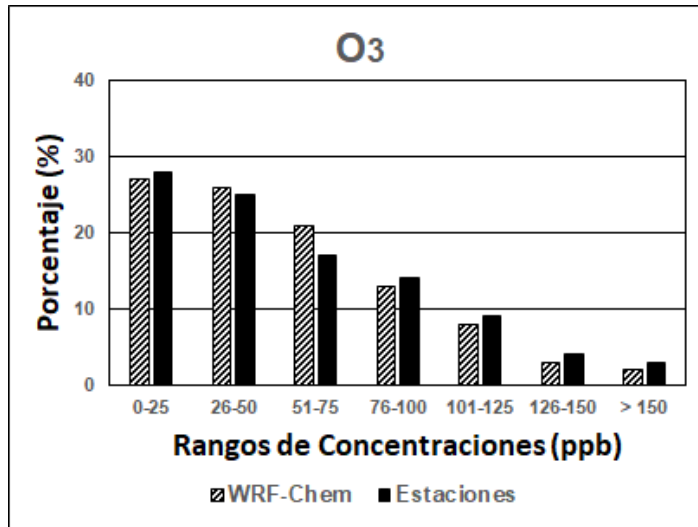


Figura 18 Porcentaje de casos dentro de los rangos definidos de concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)

Para analizar los resultados de manera puntual, se muestran en la Figura 19, las series de tiempo de las concentraciones de O₃ modeladas y observadas en algunas estaciones seleccionadas de la RAMA, mientras que en el Tabla 9 se presentan los valores de los estadísticos calculados. Lo más importante a señalar es que estas ocho estaciones muestran cifras de IOA y ρ siempre superiores a 0.88 y muy cercanas a 1, con valores medios simulados que difieren entre 4 y 14 % de las observaciones. El modelo siempre tiende a subestimar las mediciones sobre todo los picos de concentraciones máximas, oscilando MB entre -0.35 (SFE) y -8.15 (HGM). En el caso de NMB se encuentra en el rango de 0 a -1 %, mientras NME siempre es inferior a 9 %. Por su parte RMSE oscila entre 18.43 (SFE) y 23.83 (HGM). En general, la estación SFE tiene los mejores valores de las métricas calculadas mientras que HGM, los menos satisfactorios.

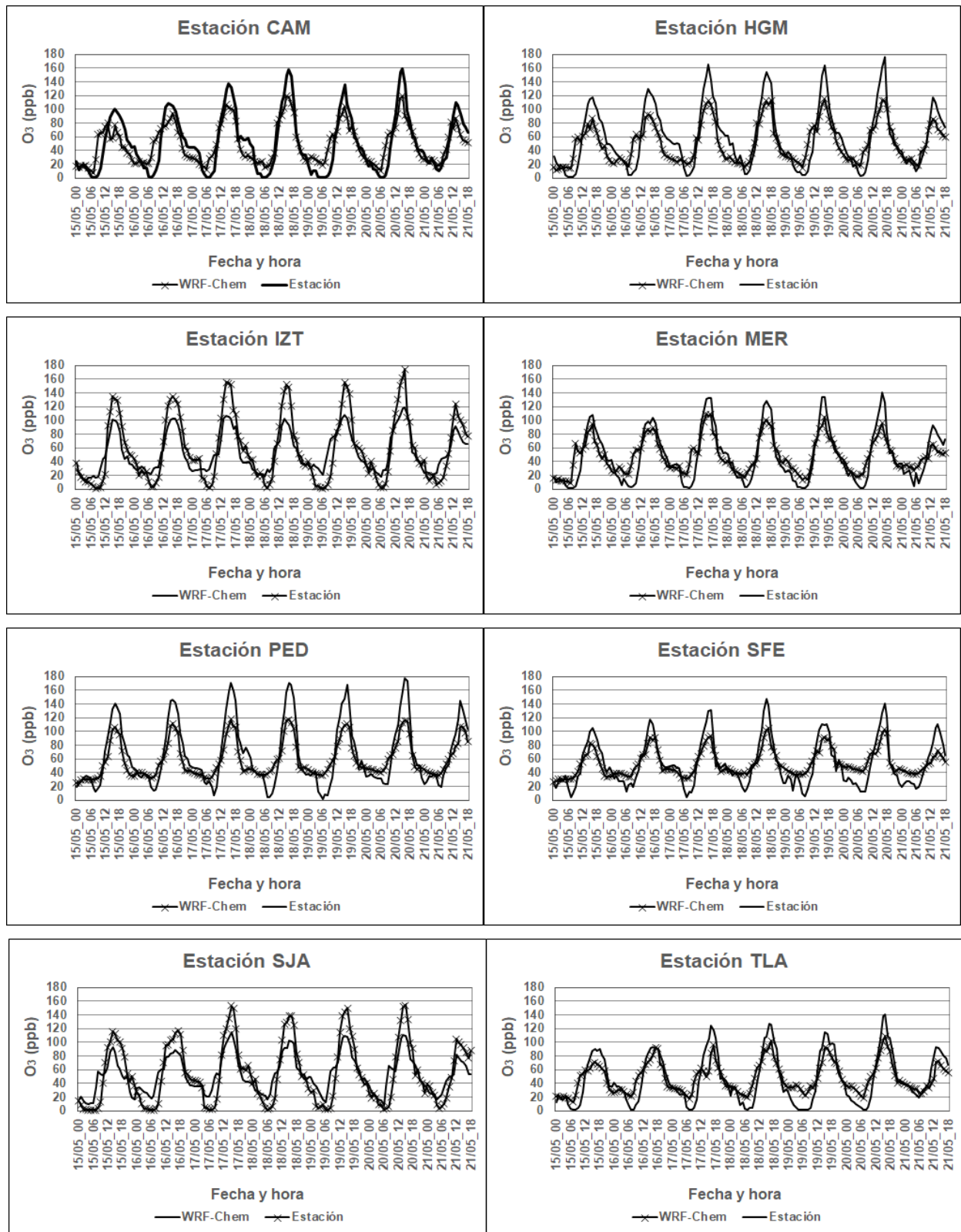


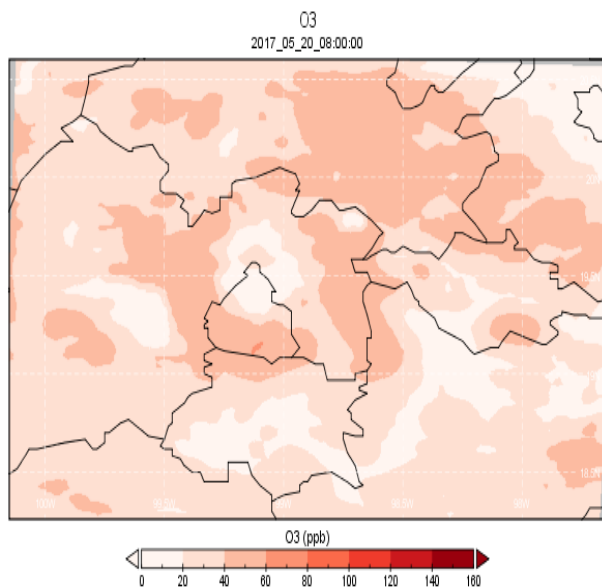
Figura 19 Series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en estaciones de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017)

Tabla 9 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación de O_3 para estaciones seleccionadas de la rama (15 al 21 de mayo de 2017, INEM-2013 actualizado)

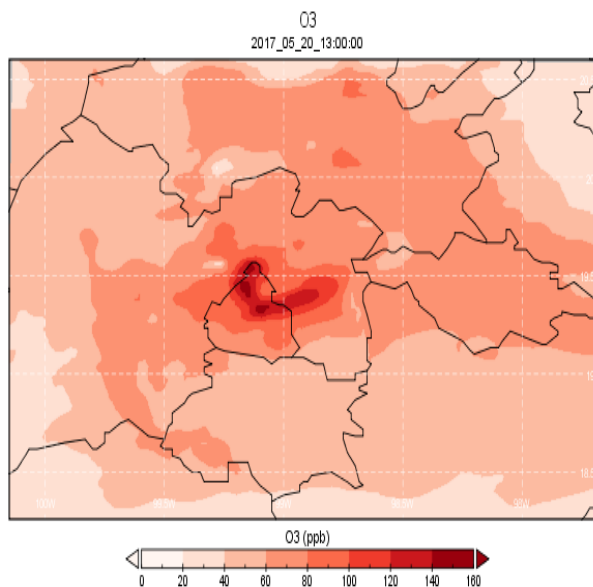
	CAM	HGM	IZT	MER	PED	SFE	SJA	TLA
$\overline{C_o}$	51.56	58.83	58.12	48.79	66.48	53.67	54.70	48.39
$\overline{C_m}$	49.52	50.74	52.80	48.14	59.17	53.39	52.42	47.21
σ_o	41.95	44.28	46.91	38.40	46.50	34.23	44.97	36.84
σ_m	28.49	28.76	28.93	24.75	26.67	19.54	27.21	22.14
MB	-2.07	-8.15	-5.26	-0.47	-7.49	-0.35	-2.23	-0.81
ME	11.76	13.04	12.63	10.95	13.16	10.88	12.93	11.21
NMB	-0.21 %	-0.98 %	-0.47 %	-0.09 %	-0.81 %	-0.07 %	-0.27 %	-0.13 %
NME	7.16 %	8.34 %	7.89 %	5.74 %	8.92 %	5.62 %	8.03 %	5.41 %
RMSE	21.41	23.83	23.07	18.85	24.07	18.43	23.21	18.93
ρ	0.89	0.88	0.92	0.90	0.92	0.93	0.91	0.90
IOA	0.91	0.90	0.91	0.92	0.91	0.93	0.90	0.91

Finalmente, se analiza el desempeño del modelo WRF-Chem en la simulación del comportamiento espacial de los contaminantes. En la Figura 20 se muestra, a modo de ejemplo, la distribución de las concentraciones medias de O_3 simuladas sobre el dominio de modelación a partir del INEM-2013 actualizado, para diferentes horarios del día 20 de mayo de 2017. Los resultados confirman la variación temporal de este contaminante, cuyas concentraciones medias van aumentando a lo largo del día. Se comprueba que los picos máximos aparecen en zonas pertenecientes a la ZMVM o muy próximas a esta, evidenciando que es la más contaminada por O_3 en el área de estudio.

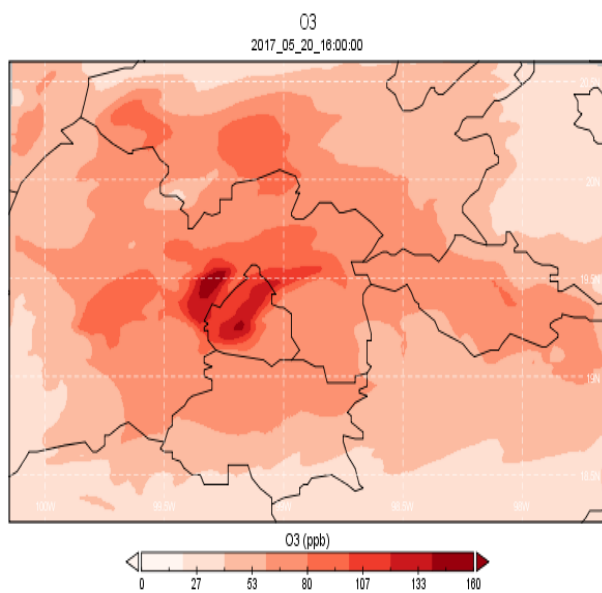
a) 08:00 horas



b) 13:00 horas



c) 16:00 horas



d) 18:00 horas

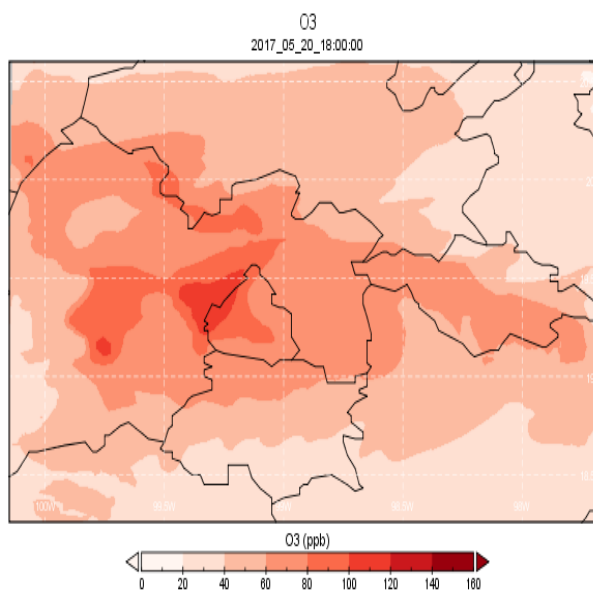


Figura 20 Distribución espacial de las concentraciones de O₃ (en ppb) obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (20 de mayo de 2017, a) 08:00, b) 13:00, c) 16:00 y d) 18:00 horas)

Se aprecia claramente que los resultados de las simulaciones con WRF-Chem a partir del INEM-2013 actualizado son mucho más cercanos a lo observado y con métricas estadísticas considerablemente superiores a las obtenidas para el caso original. La distribución temporal de las variables modeladas es muy similar a la observada en las estaciones disponibles, incluyendo valores medios y picos máximos con diferencias muy pequeñas. Además, el modelo es preciso en la simulación del comportamiento del O₃, variable que tiene la mayor importancia en los episodios de alta contaminación ambiental en el Centro de México, específicamente en la ZMVM.

3.4 Validación de los factores de escalamiento empleados en el proceso de optimización del IE

Con el objetivo de validar que los factores de escalamiento obtenidos son adecuados para modificar el INEM-2013 y la BDE derivada del mismo se puede emplear en MCA en el Centro de México en otros periodos de tiempo, se realiza una simulación de control, para los días del 14 al 17 de marzo de 2016, fechas en que se activó el PCAA por O₃ en la ZMVM.

En el Tabla 10 se muestran las métricas estadísticas obtenidas en las simulaciones con el INEM-2013 actualizado, para las variables meteorológicas y los contaminantes analizados, mientras que en la Figura 21 aparece una comparación entre los valores de IOA y ρ calculados para las distintas variables analizadas, en las modelaciones con el IE original y actualizado. Como se puede apreciar, los resultados muestran buena correlación de forma general y los valores de IOA y ρ son considerablemente superiores en las simulaciones con el INEM-2013 actualizado, sobre todo para los contaminantes atmosféricos. Se destaca en este sentido el O₃, cuyos valores superan los 0.90, mientras que en el caso de NO y NO₂, inicialmente se encontraban por debajo de 0.30 y con la actualización sobrepasan los 0.78. Las variables meteorológicas muestran ligeras variaciones, pero siempre positivas, ubicándose las cifras para HR y VV entre 0.70 y 0.80, mientras que para T₂, IOA = 0.93 y ρ = 0.92. Esto es debido a que el modelo considera la interacción entre los aerosoles secundarios generados por las reacciones atmosféricas y la radiación.

Tabla 10 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación para las variables meteorológicas y contaminantes analizados (14 al 17 de marzo de 2016, INEM-2013 actualizado)

	T ₂	HR	VV	O ₃	NO ₂	NO	CO	SO ₂
$\overline{C_o}$	18.83	38.08	1.82	48.53	34.81	21.87	815.83	3.92
$\overline{C_m}$	17.28	33.56	1.57	46.01	41.76	30.41	845.62	4.89
σ_o	5.16	14.92	1.10	41.13	18.72	36.93	414.18	3.87
σ_m	5.59	11.35	1.36	37.06	23.09	42.72	498.55	4.78
MB	-2.54	-6.61	-0.11	-3.97	6.63	11.36	44.36	1.74
ME	2.63	10.26	1.18	10.29	24.02	28.03	77.93	3.38
NMB	-1.42 %	-12.84 %	-0.92 %	-0.48 %	21.84 %	24.39 %	16.49 %	2.13 %
NME	1.77 %	19.73 %	9.82 %	6.74 %	24.37 %	20.66 %	33.07 %	2.21 %
RMSE	3.38	13.73	1.08	16.74	28.94	25.22	39.58	4.52
ρ	0.92	0.77	0.76	0.91	0.83	0.79	0.70	0.70
IOA	0.93	0.78	0.75	0.92	0.82	0.78	0.71	0.72

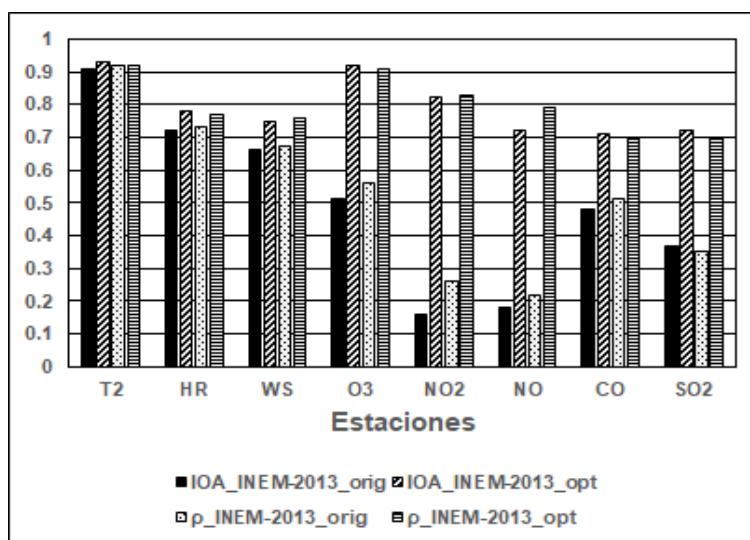


Figura 21 Comparación entre los valores de IOA y ρ calculados para las distintas variables analizadas en las modelaciones a partir del INEM-2013 actualizado y original (14 al 17 de marzo de 2016)

Para todas las variables meteorológicas, además de O₃ y CO, los valores medios modelados son muy próximos a los observados, con menos de un 15 % de variación, mientras que para NO y NO₂ difieren entre un 17 y un 20 %, ascendiendo hasta un 30 % en el caso de SO₂. El WRF-Chem tiende a subestimar las mediciones de T₂, HR, VV y O₃, con valores de MB y NMB negativos que van desde -0.11 (VV) hasta -6.61 (HR) y desde -0.48 (O₃) hasta -12.84 (HR), respectivamente, en todos los casos aceptables. Por su parte, sobrestima las observaciones de NO, NO₂, CO y SO₂, llegando MB a 44.36 para CO y NMB a 21.84 % para NO₂ y 24.39 % para NO. De igual forma se aprecian cifras de RMSE muy bajas en los casos de VV (1.08), T₂ (3.38) y SO₂ (4.52), más altas para NO (25.22), NO₂ (28.94) y CO (39.58), mientras que NME siempre es inferior al 25%, excepto para CO (33.07 %).

Debe señalarse que, en este caso de estudio de 2016, además de evidenciarse la superioridad del INEM-2013 actualizado respecto al original, se aprecia que las métricas estadísticas calculadas para el conjunto de todas las estaciones analizadas, son incluso superiores a las obtenidas para el período de 2017, o sea, hay una mayor correspondencia entre la modelación y las observaciones.

En la Figura 22 se muestra la serie de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ de todo el conjunto de estaciones disponibles con sus pares simulados a partir del INEM-2013 actualizado correspondientes. Se confirma que el WRF-Chem es capaz de describir satisfactoriamente el ciclo diario de O₃, sobre todo en los valores medios, lo cual se puede comprobar en el diagrama de dispersión de la Figura 23. Sin embargo, en cuanto a los picos de concentraciones máximas, el modelo los detecta en el horario adecuado, pero se aprecian algunas diferencias respecto a los valores observados, los cuales se subestiman, sobre todo el día 14, cuando los máximos sobrepasaron los 175 ppb e incluso los 200 ppb, mientras que las simulaciones apenas reflejaron cifras ligeramente superiores a 150 ppb. Esta situación puede estar provocada por la influencia del transporte de contaminantes de regiones cercanas hacia el área de estudio en las concentraciones de O₃ medidas en la misma, pero que no puede cuantificarse en la modelación porque esas emisiones no están consideradas dentro del dominio de la BDE que se obtiene del INEM-2013.

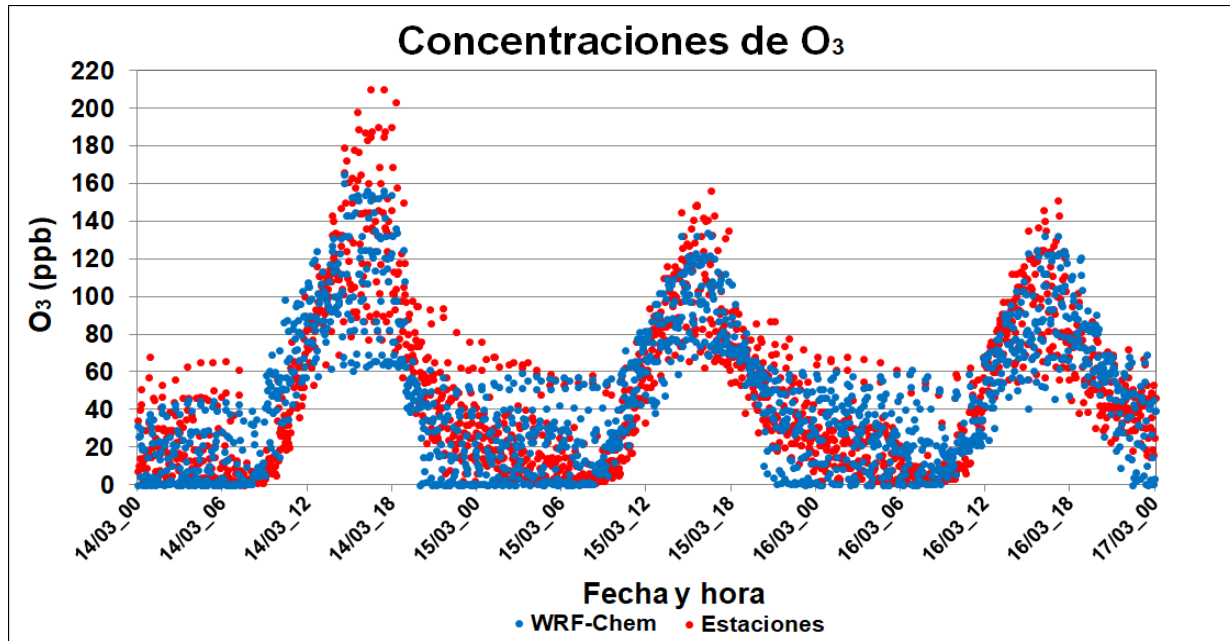


Figura 22 Series de tiempo de todas las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016)

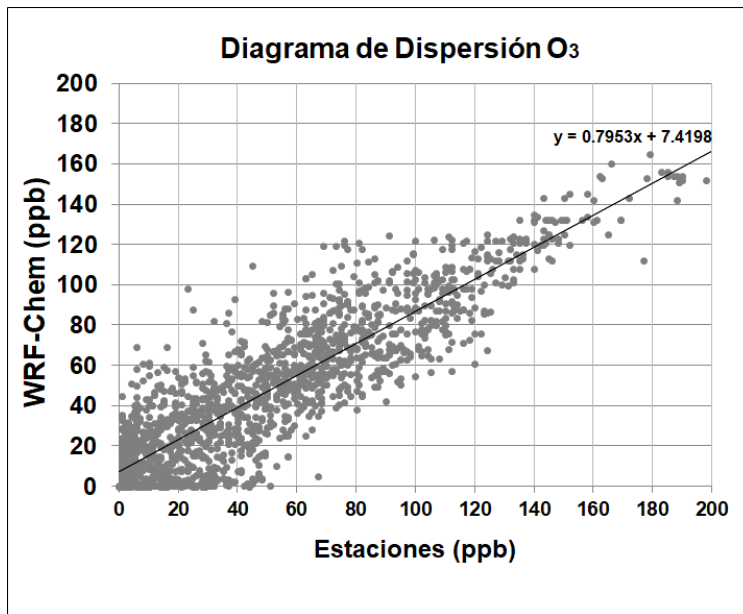


Figura 23 Diagrama de dispersión para las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016)

Las series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ modeladas y observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA, se presentan en la Figura 24, mientras que en la Tabla 11 aparecen los valores de las métricas estadísticas calculadas. Las cifras de IOA y ρ indican alta correlación en todos los casos, siempre superior a 0.89. Los valores medios simulados y observados difieren en un 10 % para CAM y alrededor de un 20 % para el resto de las estaciones. El modelo tiende a subestimar las mediciones sobre todo en los picos máximos con MB que oscila entre -3.73 (CAM) y -11.79 (HGM), mientras NMB lo hace en el rango de 0 a 1.5 % y NME siempre debajo de 8 %. Los valores de ME y RMSE son aceptables para la escala de las variables. La estación HGM presenta los peores resultados en los estadísticos mostrados, en la cual el WRF-Chem subestima en más de 40 ppb el valor máximo de concentración de O₃ alcanzado el día 14.

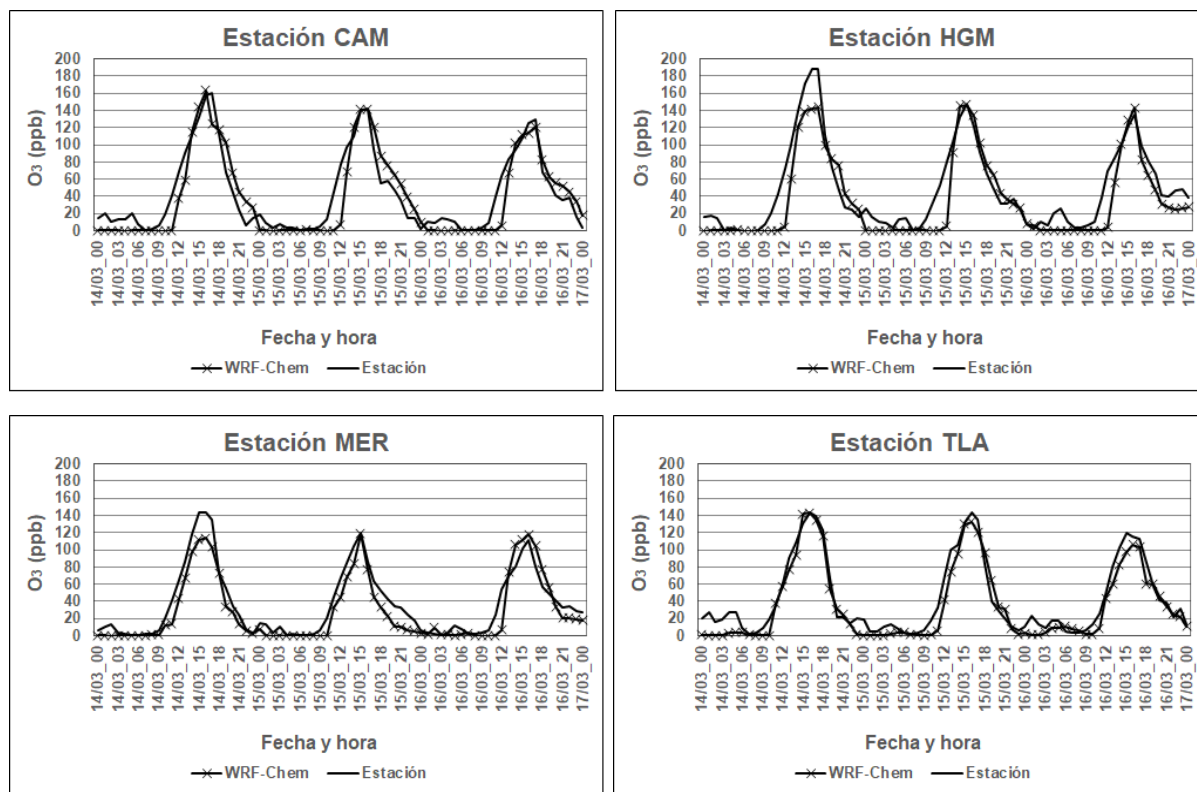


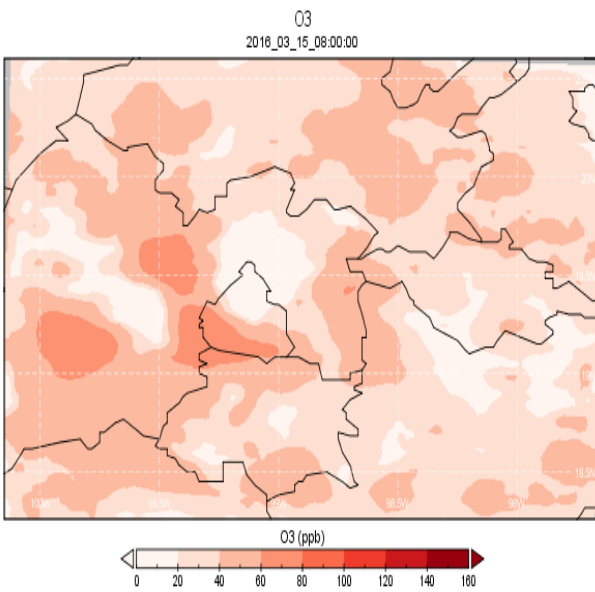
Figura 24 Series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016)

Tabla 11 Métricas estadísticas obtenidas de la modelación de O₃ para estaciones seleccionadas de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2017, INEM-2013 actualizado)

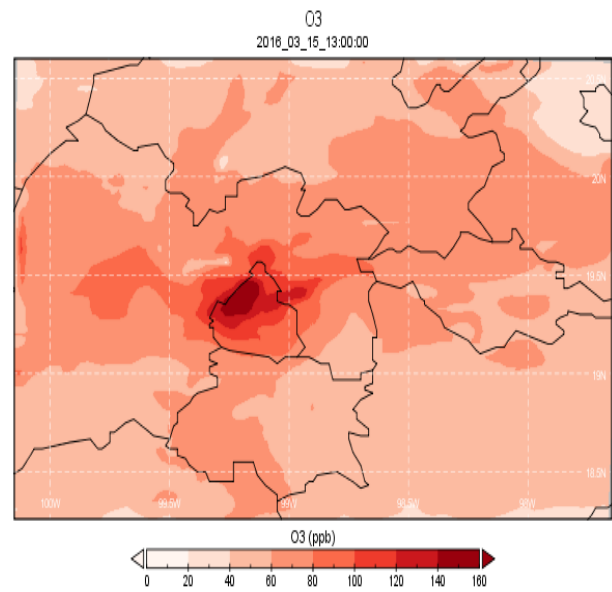
	CAM	HGM	MER	TLA
$\overline{C_o}$	43.12	48.21	37.04	43.67
$\overline{C_m}$	39.35	38.41	29.51	35.82
σ_o	46.08	49.54	39.86	44.51
σ_m	44.89	48.67	38.41	44.32
MB	-3.73	-11.79	-8.52	-7.83
ME	11.23	13.28	8.69	8.40
NMB	-0.34 %	-1.43 %	-0.96 %	-0.86 %
NME	7.09 %	7.77 %	5.12 %	5.01 %
RMSE	20.24	23.16	15.08	13.21
ρ	0.89	0.90	0.92	0.93
IOA	0.90	0.92	0.92	0.94

Finalmente, en la Figura 25 se muestra la distribución de las concentraciones medias de O₃ sobre el dominio de modelación a partir del INEM-2013 actualizado, para diferentes horarios del día 15 de marzo de 2016. Se manifiesta la capacidad del WRF-Chem de modelar, satisfactoriamente, el comportamiento espacial de la variable, con máximos observados en zonas ubicadas dentro de la ZMVM o muy próximas a esta. Se aprecia, una vez más, el ciclo diario de O₃, aumentando las concentraciones en horas de la tarde.

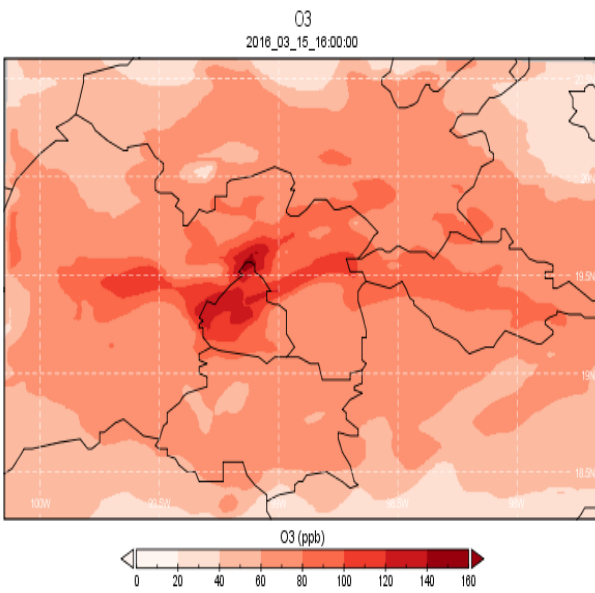
a) 08:00 horas



b) 13:00 horas



c) 16:00 horas



d) 18:00 horas

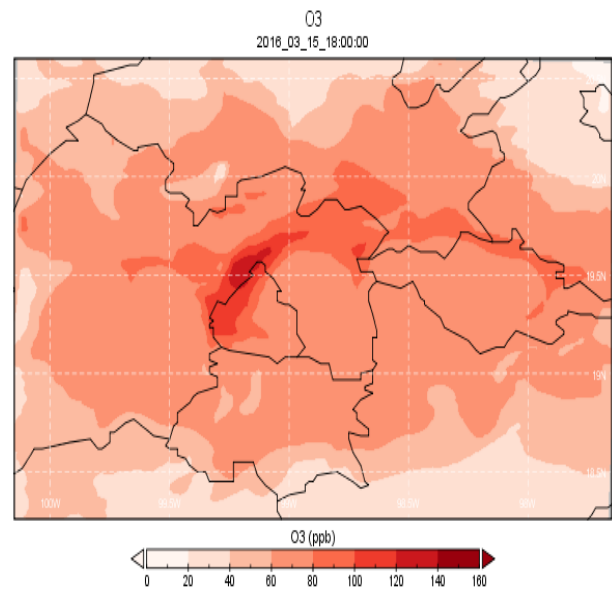


Figura 25 Distribución espacial de las concentraciones de O₃ (en ppb) obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (15 de marzo de 2016, a) 08:00, b) 13:00, c) 16:00 y d) 18:00 horas)

3.5 Evaluación de desempeño del sistema de pronóstico de calidad del aire para los años 2018 y 2019

En la Tabla 12 se muestran los valores de los estadísticos analizados para las variables meteorológicas y químicas consideradas, comparando los años 2018 y 2019 en los que se realiza el estudio, entre sí y respecto al promedio anual.

Tabla 12 Métricas estadísticas obtenidas para las variables meteorológicas y químicas consideradas

Variable	Periodo	MB	ME	NMB	NME	RMSE	ρ	IOA
T2	Anual	-2.47	2.61	-1.39 %	1.68 %	3.11	0.91	0.92
	2018	-2.50	2.65	-1.47%	1.72%	3.17	0.90	0.91
	2019	-2.43	2.56	-1.31%	1.63%	3.05	0.91	0.93
HR	Anual	-8.93	12.44	-16.26 %	22.09 %	16.37	0.73	0.75
	2018	-9.02	12.62	-16.43%	22.36%	16.77	0.71	0.74
	2019	-8.83	12.26	-16.09%	21.82%	15.96	0.75	0.77
VV	Anual	-0.31	1.23	- 0.98 %	12.86 %	1.45	0.74	0.73
	2018	-0.36	1.25	-1.12%	13.00%	1.56	0.73	0.71
	2019	-0.26	1.20	- 0.84%	12.71 %	1.33	0.75	0.75
O ₃	Anual	-9.64	14.47	-4.07 %	8.61 %	17.39	0.78	0.81
	2018	-9.93	14.68	-4.18%	8.92 %	17.64	0.76	0.79
	2019	-9.35	14.26	-3.96%	8.30 %	17.15	0.79	0.82

Los resultados de las métricas estadísticas indican un mejor desempeño del modelo en el año 2019 respecto a 2018 para las tres variables meteorológicas, aunque en ambos se alcanzan valores satisfactorios. Para T2, las métricas IOA y ρ presentan cifras superiores a 0.90, indicando muy buena correspondencia entre las observaciones y la modelación, similar a RH y VV, con cifras por encima de 0.70. El Bias negativo en todos los resultados indica una ligera subestimación por parte del modelo con respecto al valor real medido, mientras que RMSE alcanza valores acordes con la escala de la variable.

Para el O₃, los resultados son favorables, con valores de IOA y ρ superiores a 0.75, mientras que NME y NMB muestran cifras inferiores al 15% permisible por la EPA (2007). Para conocer la consistencia en los resultados del sistema de pronóstico se analizaron los valores obtenidos para los estadísticos aplicados en las previsiones de 24, 48 y 72 h, verificando si el rendimiento del mismo defiere significativamente en los diferentes plazos temporales. En la Tabla 13 se muestran las métricas estadísticas calculadas para O₃, a modo de ejemplo, durante los años 2018 y 2019.

Tabla 13 Métricas estadísticas para el O₃

Temporalidad	Periodo	MB	ME	NMB	NME	RMSE	ρ	IOA
24 h	Anual	- 8.94	13.39	- 3.38 %	7.41 %	16.34	0.80	0.84
	2018	- 9.21	13.64	- 3.61 %	7.79 %	16.57	0.78	0.82
	2019	- 8.67	13.14	- 3.14 %	7.02 %	16.11	0.82	0.85
48 h	Anual	- 9.56	14.33	- 3.94 %	8.57 %	17.48	0.77	0.81
	2018	- 9.87	14.45	- 4.16 %	8.98 %	17.72	0.76	0.79
	2019	- 9.25	14.21	- 3.73 %	8.15 %	17.24	0.78	0.82
72 h	Anual	-10.43	15.70	- 4.89 %	9.86 %	18.36	0.75	0.78
	2018	- 10.71	15.97	- 4.77 %	9.98 %	18.62	0.73	0.77
	2019	- 10.14	15.42	- 4.99 %	9.74 %	18.09	0.76	0.79

Los resultados muestran un rendimiento consistente para los intervalos de pronóstico considerados en los dos años que se evaluaron, pues los valores de los estadísticos son muy cercanos entre sí, algo superiores, cualitativamente, para el 2018 y en el menor plazo de tiempo, 24 h, disminuyendo ligeramente su efectividad para 48 y 72 h. En general, el índice IOA siempre se encuentra por encima de 0.77 y ρ superior a 0.73, lo que indica buena concordancia y alta correlación entre los resultados del modelo y las mediciones. Todos los valores del Bias son negativos, por lo que el modelo subestima las observaciones, mientras que el RMSE se ubica entre 16.11 y 18.62 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Las cifras de NME y NMB se mantienen por debajo del 15% permisible.

En cuanto a los criterios de calidad definidos en la Sección 2.7 para el pronóstico de O₃, en la Tabla 14 se muestran los resultados obtenidos para el año 2018, para las distintas métricas calculadas en los plazos temporales de 24, 48 y 72 h. El número total de salidas de pronóstico evaluables está dado por la multiplicación entre el número total de estaciones disponibles (un máximo de 24) y los días efectivos en que se pudo obtener resultados con el modelo WRF-Chem, sin que existiera ningún tipo de dificultad en su ejecución. De esta forma, se tiene un total de 7807 casos de estudio para los años 2018 y todos los resultados se ubican en las categorías de Muy Bueno (MB), Bueno (B) y Aceptable (A), sin presencia de ningún caso en el rango de Malo (M) o Muy Malo (MM).

Se observa que para 24 h se obtienen siempre los mejores resultados, mientras que, de modo general, el 100% de los pronósticos en todo el año 2018 se pueden calificar de Muy Bueno, Bueno o Aceptable, indicando la eficiencia del sistema. En términos de MB, más del 70 % de los casos presentan un comportamiento de Bueno para los tres periodos de tiempo, mientras que para RMSE, más del 80 % siempre se evalúa como tal. Difiere en este sentido el caso de ρ , métrica que muestra más de un 90 % como Muy Bueno.

Tabla 14 Criterios de calidad en el pronóstico de O₃ para todas las estaciones, períodos y métricas en el año 2018

Temporalidad	Métrica	MB	%	B	%	A	%
24 h	MB	1711	21.9	5994	76.8	102	1.3
	ρ	7528	96.4	279	3.6	0	0.0
	RMSE	216	2.8	6545	83.8	1046	13.4
48 h	MB	1549	19.8	5874	75.2	378	5.0
	ρ	7224	92.5	583	7.5	0	0.0
	RMSE	184	2.4	6386	81.8	1237	15.8
72 h	MB	1278	16.4	5762	73.8	767	9.8
	ρ	7041	90.2	766	9.8	0	0.0
	RMSE	146	1.9	6275	80.4	1386	17.8

En la Figura 26 se presenta, a modo de ejemplo, la serie temporal de las concentraciones máximas y medias diarias de O₃ observadas y pronosticadas para 24, 48 y 72 h durante los 120 días que abarcó la temporada de O₃ de 2019 (15 de feb-15 jun).

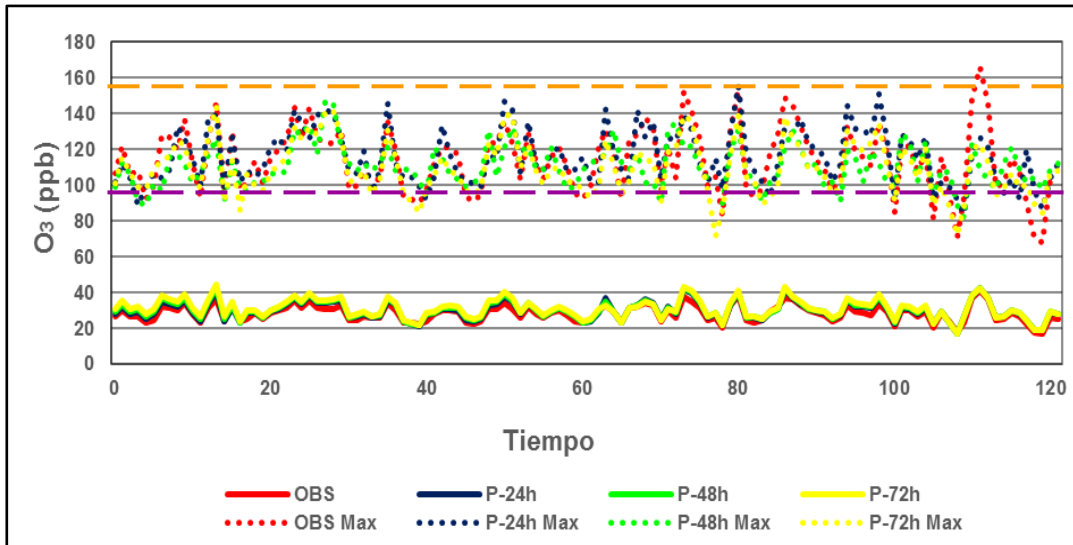


Figura 26 Serie temporal de las concentraciones de O₃ máximas y medias diarias observadas y pronosticadas en 2018. Se indica con línea discontinua roja el umbral de la Fase I de Contingencia y en color violeta el valor límite horario normado para O₃

Se aprecia que los máximos diarios sobrepasan la norma mexicana para 1 h (95 ppb) en la mayoría de los días, alcanzándose un tope de 166 ppb el 6 de junio, fecha en que se activó la Fase I de Contingencia Ambiental. El sistema de pronóstico muestra un comportamiento satisfactorio en la predicción de los valores medios diarios, sobre todo en un plazo de 24 h, mientras que, para los valores extremos, tiende a sobreestimarlos, sobre todo en los picos superiores.

En la Figura 27, se presentan las concentraciones medias de O₃ promediadas por hora del día y los respectivos valores pronosticados. Se aprecia perfectamente el ciclo diario del contaminante (Tie et al. 2007) y una vez más se observa que el modelo sobreestima las observaciones en los momentos extremos (Crutzen 1975; Chameides et al. 1976) de mínimos durante la madrugada y máximos en la tarde, hora local, con mejores resultados para el plazo de 24 h.

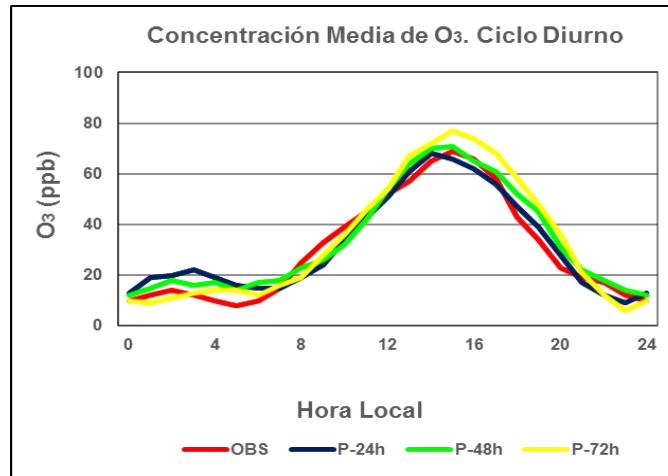


Figura 27 Ciclo diurno de las concentraciones medias diarias de O₃

Finalmente, se realizó el análisis categórico de las salidas de pronóstico del sistema de modelación para el O₃, cuyos resultados se muestran en la Tabla 15.

Tabla 15 Resultados del análisis categórico para los límites de excedencia indicados

Pronóstico	24 h		48 h		72 h	
	95 (ppb)	125 (ppb)	95 (ppb)	125 (ppb)	95 (ppb)	125 (ppb)
PS	0.94	0.96	0.91	0.93	0.90	0.92
PD	0.70	0.74	0.63	0.67	0.52	0.59
TFA	0.83	0.78	0.86	0.80	0.92	0.85
IEC	0.17	0.21	0.14	0.19	0.12	0.15

Los resultados muestran valores muy similares en los parámetros calculados para ambos límites de excedencia y para los tres plazos de pronóstico, aunque se aprecia una ligera superioridad en los pronósticos de 24 h y para concentraciones de O₃ superiores a 125 ppb. Se obtuvieron altos valores de PS y PD, así como aceptables de IEC, lo que indica que el modelo simula adecuadamente las condiciones ambientales observadas, sobre todo los picos máximos. Sin embargo, los valores de TFA relativamente altos son muestra de que el modelo tiende a sobreestimar las observaciones, creando en ocasiones falsas alarmas.

CONCLUSIONES

En este estudio se aplica el modelo DiETE al INEM-2013 para obtener una BDE útil para la modelación de la calidad del aire en el Centro de México. Se realizan simulaciones numéricas con el modelo WRF-Chem en períodos de tiempo seleccionados, teniendo en cuenta la activación del PCAA en la ZMVM para los años 2017 y 2016.

Los resultados obtenidos se comparan con observaciones de estaciones de la RAMA disponibles para el caso de estudio de 2017 y se muestra que el INEM-2013 se puede actualizar para describir el comportamiento de los contaminantes que afectan el área de interés. Esto se sustenta en el análisis de las métricas estadísticas calculadas para cada variable y las series de tiempo que se obtienen para O_3 , en sus concentraciones medias y máximas. Los valores simulados difieren de los observados considerablemente, sobre todo en los registros extremos, con tendencia a subestimar las concentraciones de CO y O_3 y sobrestimar NO_2 , NO y SO_2 , superando el 700 % para NO_2 .

Teniendo en cuenta las incertidumbres existentes durante el proceso de elaboración de un IE, lo cual puede conllevar a errores en las simulaciones numéricas con MCA, se lleva a cabo un proceso de actualización del INEM-2013, a partir de una metodología basada en el cálculo de factores de escalamiento. De esta forma se obtiene un conjunto de ellos para las emisiones de contaminantes criterio para obtener una BDE actualizada con la cual los resultados del WRF-Chem muestren concentraciones de O_3 similares a las observadas.

Se evalúan nuevamente las salidas del modelo y se comprueba que el uso del INEM-2013 actualizado resulta en una mejoría considerable en el desempeño del WRF-Chem, según los valores de los estadísticos considerados. Las cifras de IOA y ρ son siempre superiores a 0.65 para todos los contaminantes, llegando a 0.88 y 0.86, respectivamente, en el caso del O_3 , el más importante en el área de interés. Precisamente el O_3 presenta concentraciones similares a las observadas en cuanto a su distribución temporal (ciclo diario característico y valores medios y extremos consistentes con las mediciones) y en su comportamiento espacial (máximas concentraciones en puntos dentro de la ZMVM).

Debe señalarse que el modelo mantiene la tendencia a subestimar las observaciones de O_3 , aunque solo ligeramente, con un MB = -3.89 y NMB de solo -0.34 %.

Los factores de escalamiento obtenidos son validados mediante la evaluación de los resultados de las simulaciones numéricas realizadas para el caso de estudio de 2016, los cuales son nuevamente superiores al emplearse el INEM-2013 actualizado, incluso respecto al primer período. Los valores de IOA y ρ sobrepasan la cifra de 0.70 para todos los contaminantes, mejorando considerablemente los registros iniciales para NO_2 y NO. En el caso del O_3 ambas métricas superan 0.90 y se mantiene el buen desempeño del WRF-Chem en la simulación de sus características espacio-temporales, aunque persiste en subestimar las observaciones ligeramente, con MB = -3.97 y NMB = -0.48 %, comportamiento que se acrecienta en los picos máximos, con diferencias que superan 40 ppb.

También se presentan las métricas estadísticas para todas las variables y series de tiempo de O_3 para un conjunto de estaciones de la RAMA, seleccionadas en cada caso de estudio, teniendo como denominador común el hecho de que la estación HGM presenta los resultados menos satisfactorios.

En cuanto a las variables meteorológicas evaluadas (T_2 , HR y VV) el modelo presenta siempre un excelente rendimiento, ligeramente superior cuando se emplea el INEM-2013 actualizado.

En general, se demuestra que el INEM-2013 actualizado a partir de una metodología consistente, permite obtener una BDE lista para la modelación de la calidad del aire en el Centro de México con el WRF-Chem, con altas correlaciones en los resultados, tanto en la descripción del comportamiento de las variables meteorológicas como de los contaminantes atmosféricos que afectan el área de estudio, principalmente el O_3 .

Luego de realizar la evaluación del desempeño del sistema de pronóstico para los años 2018 y 2019 se concluye que el mismo obtiene resultados satisfactorios para ambos años, tanto en las variables meteorológicas como en los contaminantes considerados, ligeramente superiores cualitativamente para el 2019.

Tanto el índice IOA como ρ muestran valores por encima de 0.90 para T_2 y 0.70 para RH, VV y O_3 , con alguna subestimación por parte del modelo con respecto a las observaciones, dado por un Bias negativo en todos los casos.

En cuanto a la comparación por periodos de tiempo del pronóstico, el sistema de modelación muestra consistencia en los plazos de 24, 48 y 72 h, con valores de los estadísticos muy cercanos entre sí, algo superiores cualitativamente para el año 2018 y en el plazo de 24 h. El índice IOA y ρ siempre superiores a 0.77 y 0.73, respectivamente.

Relacionado con los criterios de calidad descritos en la sección 2.7, para el año 2018 se obtiene que el 100% los pronósticos realizados por el sistema de modelación, para los distintos plazos temporales, se clasifican como Muy Bueno, Bueno o Aceptable. Específicamente, para el estadístico MB, más del 70% de los casos presentan un comportamiento al menos Bueno, mientras que, para el RMSE, más del 80% se califica como tal, en tanto para ρ , más del 90% de los pronósticos son al menos Muy Bueno.

El sistema de pronóstico muestra un comportamiento satisfactorio en la predicción de los valores medios diarios, sobre todo en un plazo de 24 h, mientras que, para los valores extremos, tiende a sobreestimarlos, sobre todo en los picos superiores diarios o en los mínimos durante la madrugada, hora local.

El análisis categórico muestra valores muy similares en los parámetros calculados para ambos límites de excedencia y para los tres plazos de pronóstico, aunque se aprecia una ligera superioridad en los pronósticos de 24 h y para concentraciones de O_3 superiores a 125 ppb, indicando que el modelo simula adecuadamente las condiciones ambientales observadas, aunque en ocasiones puede sobreestimar los valores extremos causando falsas alarmas.

En general, la investigación fue satisfactoria pues permitió demostrar las capacidades del sistema de modelación de calidad del aire basado en WRF-Chem para el Centro de México y ajustarlo en cuanto a su configuración y mejoras operativas para obtener una herramienta más precisa y confiable que puede aplicarse en todo el país.

RECOMENDACIONES

A partir de este trabajo se recomienda utilizar la metodología propuesta para identificar los factores de escalamiento de forma estacional y también la obtención de estos para la distribución espacial dentro del área de estudio, mediante el empleo de observaciones satelitales. Finalmente, este proceso puede aplicarse para ayudar a la identificación de la incertidumbre en los IE.

REFERENCIAS

- Almanza V.H., Molina L.T., Li G., Fast J. y Sosa G. (2014). Impact of external industrial sources on the regional and local SO₂ and O₃ levels of the Mexico megacity. *Atmos. Chem. Phys.* 14 (16), 8483-8499. DOI: 10.5194/acp-14-8483-2014

- CAME (2016). Se Activa Fase I de Contingencia Ambiental Atmosférica por Ozono en la Zona Metropolitana del Valle de México. Comisión Ambiental de la Megalópolis. Comunicado de Prensa Num. 06/2016. Ciudad de México, 14 de marzo de 2016. Disponible en:
<https://www.gob.mx/comisionambiental/prensa/comunicado-de-prensa-26192?idiom=es>

- Chen F. y Dudhia J. (2001). Coupling an advanced land surface–hydrology model with the Penn State–NCAR MM5 modeling system, Part I: Model description and implementation, *Mon. Weather Rev.* 129, 569-585. DOI: 10.1175/1520-0493(2001)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2

- de Foy B., Clappier A., Molina L.T. y Molina M.J. (2006). Distinct wind convergence patterns in the Mexico City basin due to the interaction of the gap winds with the synoptic flow. *Atmos. Chem. Phys.* 6, 1249-1265. DOI: 10.5194/acp-6-1249-2006

- Dudhia J. (1989). Numerical study of convection observed during the Winter Monsoon Experiment using a mesoscale two-dimensional model. *J. Atmos. Sci.* 46, 3077-3107. DOI: 10.1175/1520-0469(1989)046<3077:NSOCOD>2.0.CO;2

- EPA (2007). Guidance on the Use of Models and Other Analyses for Demonstrating Attainment of Air Quality Goals for Ozone, PM_{2.5}, and Regional Haze. Technical Report. EPA-454/B-07-002. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards. AP-42. 5th Edition, Volume VI, Chapter 13, Section 13.2.1. Paved Roads.

- Fast J.D., Gustafson W.I. Jr., Easter R. C., Zaveri R.A., Barnard J. C., Chapman E. G., Grell G. A. y Peckham S.E. (2006). Evolution of ozone, particulates, and aerosol direct radiative forcing in the vicinity of Houston using a fully coupled meteorology-chemistry-aerosol model. *J. Geophys. Res.* 111, D21305. DOI: 10.1029/2005JD006721

- Forkel R., Werhahn J., Hansen A.B., McKeen S., Peckham S., Grell G., Suppan P. (2012). Effect of aerosol-radiation feedback on regional air quality – A case study with WRF/Chem. *Atmos. Environ.* 53, 202-211. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2011.10.009

- García-Escalante J.S., García-Reynoso J.A., JazcilevichDiamant A. y Ruiz-Suárez L.G. (2014). The influence of the Tula, Hidalgo complex on the air quality of the Mexico City Metropolitan Area. *Atmósfera.* 27 (2), 215- 225. DOI: 10.1016/S0187-6236(14)71111-7

- García-Reynoso J.A. (2002). Evaluación de escenarios utilizando el modelo regional de calidad del aire Multiscale Climate Chemistry Model. Tesis de Doctorado. Centro de Ciencias de la Atmósfera, Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México, México, 14 pp.

- García-Reynoso J.A., Jazcilevich A., Ruiz-Suárez L.G., Torres-Jardón R., Suárez Lastra M. y Reséndiz Juárez N.A. (2009). Ozone weekend effect analysis in Mexico City. *Atmósfera.* 22 (3), 281-297

- García-Reynoso J.A, Mar-Morales B.E. y Ruiz-Suarez L.G. (2018). Modelo de distribución espacial, temporal y de especiación del Inventario de Emisiones de México (año base 2008) para su uso en modelización de calidad del aire (DiETE). *Rev. Int. Contam. Ambie.* 34 (4), 635-649. DOI: 10.20937/RICA.2018.34.04.07

- Grell G.A., Peckham S.E., Schmitz R., McKeen S.A., Frost G., Skamarock W.C. y Eder B. (2005). Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. *Atmos. Environ.* 39, 6957-6975. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2005.04.027

- Guenther A., Zimmerman P. y Wildermuth M. (1994). Natural volatile organic compound emission rate estimates for U.S. Woodland landscapes. *Atmos. Environ.* 28, 1197-1210.

DOI: 10.1016/1352-2310(94)90297-6

- Guenther A., Karl T., Harley P., Wiedinmyer C., Palmer P. I. y Geron, C. (2006). Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature). *Atmos. Chem. Phys.* 6, 3181–3210. DOI: 10.5194/acp-6-3181-2006

- Guevara M., Tena C., Soret A., Serradell K., Guzmán D., Retama A., Camacho P., Jaimes-Palomera M. y Mediavilla A. (2017). An emission processing system for air quality modelling in the Mexico City metropolitan area: Evaluation and comparison of the MOBILE6.2- Mexico and MOVES-Mexico traffic emissions. *Sci. Total Environ.* 584-585, 882-900.

DOI: 10.1016/j.scitotenv.2017.01.135

- Hao J., Tian H. y Lu Y. (2002). Emission inventories of NO_x from commercial energy consumption in China, 1995-1998. *Environ. Sci. Technol.* 36, 552-560. DOI: 10.1021/es015601k

- Hernández J.O. (2006). Actualización del inventario de emisiones para el pronóstico de la calidad del aire en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México. Tesis de Licenciatura. Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México, México, 86 pp.

- Hong S.Y., Dudhia J. y Chen S.H. (2004). A revised approach to ice microphysical processes for the bulk parameterization of clouds and precipitation. *Mon. Weather. Rev.* 132, 103-120. DOI: 10.1175/1520-0493(2004)132<0103:ARATIM>2.0.CO;2

- Hong S.Y., Noh Y. y Dudhia J. (2006). A new vertical diffusion package with an explicit treatment of entrainment processes. *Mon. Weather Rev.* 134, 2318-2341.

DOI: 10.1175/MWR3199.1

- Huang C., Chen C.H., Li L., Cheng Z., Wang H.L., Huang H.Y., Streets D.G., Wang Y.J., Zhang G.F. y Chen Y.R. (2011). Emission inventory of anthropogenic air pollutants and VOC species in the Yangtze River Delta region, China. *Atmos. Chem. Phys.* 11 (9), 4105-4120.

DOI: 10.5194/acp-11-4105-201

- INECC (2017). Preparación de un inventario de emisiones para modelación. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Informe final. Ciudad de México, México, 35 pp. Disponible en:

https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/310811/Informe_INECC_RP_A1-004_2017_Inventario_para_Modelaci_n_V3.pdf

- INECC (2018). Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero 1990-2015. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Resumen Informativo. Ciudad de México, México, 10 pp.

Disponible en: <https://cambioclimatico.gob.mx/sexta-comunicacion/material/Inventario.pdf>

- INECC (2020). Informe Nacional de la Calidad del Aire 2019, México. Coordinación General de Contaminación y Salud Ambiental, Dirección de Investigación de Calidad del Aire y Contaminantes Climáticos. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Ciudad de México, México, 385 pp.

- Jazcilevich A.D., García A.R., Grutter M., Delgado J., Ayala U.D., Lastra M.S., Zuk M., Oropeza R.G., Lents J. y Davis N. (2011). An evaluation of the hybrid car technology for the Mexico mega city. *J. Power Sources.* 196 (13), 5704-5718. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2011.01.076

- Kain J.S. y Fritsch J.M. (1993). Convective parameterization for mesoscale models: the Kain-Fritsch scheme. En: *The representation of cumulus convection in numerical models* (K.A. Emanuel, D.J. Raymond, Ed.). Amer. Meteor. Soc. 165-170.
DOI: 10.1007/978-1-935704-13-3_16

- Kain J.S. (2004). The Kain-Fritsch convective parameterization: an update. *J. Appl. Meteorol.* 43, 170-181. DOI: 10.1175/1520-0450(2004)0432.0.CO;2

- Keenan T., Niinemets U., Sabate S., Gracia C. y Penuelas J. (2009). Process based inventory of isoprenoid emissions from European forests: model comparisons, current knowledge and uncertainties. *Atmos. Chem. Phys.* 9 (12), 4053-4076. DOI: 10.5194/acp-9-4053-2009

- Li M.J., Chen D.S., Cheng S.Y., Wang F., Li Y., Zhou Y. y Lang J.L. (2010). Optimizing emission inventory for chemical transport models by using genetic algorithm. *Atmos. Environ.* 44 (32), 3926-3934. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2010.07.010

- López C. (2008) *Introducción a la Gestión de la Calidad del Aire*. Centro de Química y Contaminación Atmosférica. La Habana, Cuba.

- Lumbreras J., García-Martós C., Mira J. y Borge R. (2009). Computation of uncertainty for atmospheric emission projections from key pollutant sources in Spain. *Atmos. Environ.* 43 (8), 1557-1564. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2008.10.048

- Mlawer E.J., Taubman S.J., Brown P.D., Iacono M.J. y Clough S.A. (1997). Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave. *J. Geophys. Res. Atmos.* 102, 16663–16682. DOI:10.1029/97JD00237

- Ortiz L.M. (2005). *Sistema para el procesamiento de emisiones atmosféricas (SPEA, v. 1.0.0)*. Instituto Nacional de Ecología, México, 107 pp.

- Pielke R.A. (1984). Mesoscale Meteorological Modeling, Academic Press, London.

- Rew R.K. y Davis G.P. (1990). NetCDF: An interface for scientific data access. IEEE Comput. Graph. Appl. 10 (4), 76-82. DOI: 10.1109/38.56302

- SEDEMA (2016). Aviso por el que se da a conocer el Programa para Contingencias Ambientales Atmosféricas en la Ciudad de México. Secretaria del Medio Ambiente del Gobierno de la Ciudad de México. Gaceta Oficial de la Ciudad de México No. 44, 6 de abril de 2016. Ciudad de México, México.

- SEDEMA (2020). Calidad del aire en la Ciudad de México, Informe 2018. Dirección General de Calidad del Aire, Dirección de Monitoreo de Calidad del Aire. Secretaría del Medio Ambiente de la Ciudad de México. Ciudad de México, México, 1733 pp. Disponible en: <http://www.aire.cdmx.gob.mx/descargas/publicaciones/informe-anual-calidad-del-aire-2018.pdf>

- SEMARNAT (2002). Programa para Mejorar la Calidad del Aire de la Zona Metropolitana del Valle de México (ProAire) 2002-2010. Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Informe Final. Ciudad de México, México, 386 pp.

- SEMARNAT (2015). Guía para la Elaboración de los Programas de Gestión para Mejorar la Calidad del Aire (ProAire). Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Informe Final. Ciudad de México, México, 46 pp.

- SEMARNAT (2017). Se Activa Fase I de Contingencia Ambiental Atmosférica por Ozono. Comisión Ambiental de la Megalópolis (CAME). Secretaria de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Comunicado de Prensa No. 47/2017. Ciudad de Mexico, 15 de mayo de 2017. Disponible en: <https://www.gob.mx/semarnat/prensa/se-activa-fase-i-de-contingencia-ambiental-atmosferica-por-ozono-107342?idiom=es-MX>

- Song J., Lei W., Bei N., Zavala M., De Foy B., Volkamer R., Cardenas B., Zheng J., Zhang R. y Molina L.T. (2010). Ozone response to emission changes: A modeling study during the MCMA-2006/MILAGRO campaign. *Atmos. Chem. Phys.* 10 (8), 3827-3846. DOI: 10.5194/acp-10-3827-2010

- Sowden M., Cairncross E., Wilson G., Zunckel M., Kirillova E., Reddy V. y Hietkamp S. (2008). Developing a spatially and temporally resolved emission inventory for photochemical modeling in the City of Cape Town and assessing its uncertainty. *Atmos. Environ.* 42 (30), 7155-7164. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2008.05.048

- SSA (2014). Norma Oficial Mexicana NOM-020-SSA1-2014. Salud ambiental. Valor límite permisible para la concentración de ozono (O₃) en el aire ambiente y criterios para su evaluación. Secretaría de Salud. Diario Oficial de la Federación. 19 de agosto de 2014.

- Stockwell W., Middleton P., Chang J. y Xiaoyan T. (1990). The second generation Regional Acid Deposition Model chemical mechanism for regional air quality modeling. *J. Geophys. Res. Atmos.* 95, 16343-18367. DOI: 10.1029/JD095iD10p16343

- Stephens S., Madronich F., Wu F., Olson J. B., Ramos R., Retama A. y Muñoz R. (2008). Weekly patterns of Mexico City's surface concentrations of CO, NO_x, PM₁₀ and O₃ during 1986-2007. *Atmos. Chem. Phys.* 8, 5313-5325. DOI: 10.5194/acp-8-5313-2008

- Streets D.G., Bond T.C., Carmichael G.R., Fernandes S.D., Fu Q., He D., Klimont Z., Nelson S.M., Tsai N.Y., Wang M.Q., Woo J.H. y Yarber K.F. (2003). The MICS-Asia Phase II emission inventory. En: *The Sixth Workshop on the Transport of Air Pollutants in Asia (Model Intercomparison StudydMICS-Asia)*. International Institute for Applied Systems Analysis, Laxenburg, Austria.

- Tie X., Madronich S., Li G.H., Ying Z., Zhang R., Garcia A., Lee-Taylor J. y Liu Y. (2007). Characteristics of chemical oxidants in Mexico City: a regional chemical dynamical model (WRF-Chem) study. *Atmos. Environ.* 41, 1989–2008. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2006.10.053

- Trejo V. (2017) Comparación de dos mecanismos químicos en la modelación de la calidad del aire en el Valle de México. Tesis de Licenciatura. Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México, México, 78 pp.

- Turtós L., Capote G., Fonseca Y., Álvarez L., Sánchez M., Bezanilla A., Borrajero I., Meneses R. y Pire S. (2013). Assessment of the Weather Research and Forecasting model implementation in Cuba addressed to diagnostic air quality modeling. *Atmos. Pollut. Res.* 4 (1), 64-74. DOI: 10.5094/APR.2013.007

- Urías C. (2015). Actualización del inventario de emisiones del 2008 para el pronóstico de la calidad del aire en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México. Tesis de Licenciatura. Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México, México, 67 pp.

- Willmott C.J. (1981). On the validation of models. *Phys. Geogr.* 2, 184-194. DOI: 10.1080/02723646.1981.10642213

- Willmott C.J., Ackleson S.G., Davis R.E., Feddema J.J., Klink K.M., Legates D.R., O'Donnell J. y Rowe C.M. (1985). Statistics for the evaluation of model performance. *J. Geophys. Res.* 90, 8995–9005. DOI: 10.1029/JC090iC05p08995

-

- Ying Z., Shuiyuan C., Jianbing L., Jianlei L., Li L. y Dongsheng C. (2012). A new statistical modeling and optimization framework for establishing high-resolution PM₁₀ emission inventory – II. Integrated air quality simulation and optimization for performance improvement. *Atmos. Environ.* 60, 623-631. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2012.07.055

- Yumimoto K. y Uno I. (2006). Adjoint inverse modeling of CO emissions over Eastern Asia using four-dimensional variational data assimilation. *Atmos. Environ.* 40, 6836-6845. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2006.05.042
- Zavala M., Lei W., Molina M. J. y Molina, L. T. (2009). Modeled and observed ozone sensitivity to mobile-source emissions in Mexico City. *Atmos. Chem. Phys.* 9, 39–55. DOI: 10.5194/acp-9-39-2009
- Zhang D. y Anthes R.A. (1982). A high-resolution model of the planetary boundary layer – sensitivity tests and comparisons with SESAME-70 Data. *J. Appl. Meteorol.* 21, 1594–1609. DOI: 10.1175/1520-0450(1982)021<1594:AHRMOT>2.0.CO;2
- Zhang Y. y Dubey M.K. (2009). Comparisons of WRF/ Chem simulated O₃ concentrations in Mexico City with ground-based RAMA measurements during the MILAGRO period. *Atmos. Environ.* 43 (30), 4622- 4631. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2009.05.039
- Zhang Y., Dubey M.K., Olsen S.C., Zheng J. y Zhang R. (2009). Comparisons of WRF-Chem simulations in Mexico City with ground-based RAMA measurements during the 2006-MILAGRO. *Atmos. Chem. Phys.* 9 (11) 3777-3798. DOI: 10.5194/acp-9-3777-2009