

03095 1
6

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
CENTRO DE CIENCIAS DE LA ATMOSFERA
POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA



EVALUACIÓN DE ESCENARIOS UTILIZANDO EL
MODELO REGIONAL DE CALIDAD DEL AIRE
MULTISCALE CLIMATE CHEMISTRY MODEL

TESIS

Para obtener el grado de:
Doctor en ciencias
(Fisicoquímica de la atmósfera)

Presenta:

M. en I. José Agustín García Reynoso

Tutor: Dr. Luis Gerardo Ruiz Suárez
Co-Tutor: Dr. Aron Jazcilevich Diamant



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.

Agradezco el apoyo y amistad de mis asesores:

Dr. Arón Jazcilevich Diamant

Dr. Luis Gerardo Ruiz Suárez

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología
(CONACYT)

Dedicado a
Mi familia y amigos
por el apoyo recibido para la elaboración de este trabajo

Jolin, Vladimir, Delibes y Victor Magaña
Centro de Ciencias de la Atmósfera

Renate Forkel, Thomas Shoenemeyer, Gerhard Smiatek
Instituto Fraunhofer (Alemania)

Richard Turco y Rong Lu
UCLA

Hermman Herz
GIZ-México

ÍNDICE GENERAL

- 1... **Introducción** 3

- 2... **Escenario de Emisiones** 6
 - 2.1. **Introducción** 6
 - 2.2. **Características del Escenario** 6
 - 2.2.1. **Compuestos del Escenario** 6
 - 2.2.2. **Clasificación de las Fuentes de Emisión** 7
 - 2.2.3. **Método General** 7
 - 2.2.4. **Resolución Espacial y Temporal del Escenario** 8
 - 2.3. **Emisiones Biogénicas** 9
 - 2.4. **Emisiones Antropogénicas** 9
 - 2.4.1. **Fuentes Puntuales** 10
 - 2.4.2. **Emisiones de Área** 12
 - 2.4.3. **Emisiones Móviles** 14
 - 2.5. **Especiación de Emisiones** 16
 - 2.6. **Discusión** 17

- 3... **Descripción de MCCM** 19
 - 3.1. **Dinámica** 19
 - 3.2. **Transporte Turbulento en la Capa Límite (PBL)** 20
 - 3.3. **Parametrización Multicapas de Suelo/Vegetación** 21
 - 3.4. **Química en la Fase Gaseosa** 22
 - 3.5. **Frecuencias de Fotólisis** 22
 - 3.6. **Emisiones Biogénicas** 23
 - 3.7. **Deposición Seca** 23
 - 3.8. **Procedimientos Numéricos y Aspectos Computacionales** 24

- 4.. **Módulo Químico** 25
 - 4.1. **Introducción** 25
 - 4.2. **Química Inorgánica** 26
 - 4.3. **Química Orgánica** 27
 - 4.4. **Reacciones entre Radicales Peroxi** 30

5...	Evaluación del Modelo Meteorológico	31
5.1.	Antecedentes	31
5.2.	Descripción de la Región de Estudio	31
5.3.	Datos Utilizados	32
5.3.1.	Datos Meteorológicos	32
5.3.2.	Datos de la RAMA	33
5.4.	Estrategia de Anidamiento	34
5.4.1.	Selección de Días con Altos Índices de Contaminación	35
5.5.	Evaluación del Modelo	37
5.5.1.	Evaluación Cualitativa	37
5.5.2.	Estudio Estadístico	51
5.5.3.	Discusión	54
5.6.	Sensibilidad al Campo de Vientos	56
5.6.1.	Generación del Campo de Vientos Modificado	56
5.6.2.	Transporte de Monóxido de Carbono	61
5.6.3.	Fotoquímica	62
5.6.4.	Discusión	65
5.7.	Conclusiones	66
6...	Aplicaciones	67
6.1.	Efecto por Regeneración de los Lagos	67
6.1.1.	Primer Experimento: Uso de Suelo Actual	68
6.1.2.	Segundo Experimento: El Lago Virtual	68
6.1.3.	Conclusiones	74
6.2.	Contaminación Atmosférica Debida al Sector Energético	75
6.2.1.	Procedimiento	76
6.2.2.	Resultados	76
6.2.3.	Conclusiones	86
7...	Conclusiones	87
	Apéndices	89
A...	Parámetros Estadísticos	90
A.1.	Estadística Rotacional	91
B...	Factores de Emisión de Fuentes Móviles	93
C...	Especiación	94
D...	Emisiones Biogénicas	96
D.1.	Estimación de Emisiones	96
D.2.	Especiación	98
D.3.	Términos de Corrección	98

Glosario	100
Referencias	106

ÍNDICE DE CUADROS

2.1	Usos de suelo	9
2.2	Fuentes puntuales. Información empleada	11
2.3	Tipos de fuentes puntuales	11
2.4	Distribución temporal de emisiones de área	14
4.1.	Reacciones de RADM2	29
5.1.	Estrategia de anidamiento	34
5.2.	Estadísticos de temperatura. Caso 1	52
5.3.	Estadísticos de temperatura. Caso 2	52
5.4.	Estadísticos de temperatura. Caso 3	52
5.5.	Estadísticos de magnitudes de viento caso 1	53
5.6.	Estadísticos de magnitudes de viento para caso 2	53
5.7.	Estadísticos de magnitudes de viento para caso 3	53
5.8.	Estadísticos de direcciones de viento caso 1	53
5.9.	Estadísticos de direcciones de viento caso 2	54
5.10.	Estadísticos de direcciones de viento caso 3	54
5.11.	Criterios estadísticos (vientos corregidos)	57
5.12.	Factor α , índices de congruencia promedio de vientos originales y con modificación	57
5.13.	Ic para CO (campo de vientos original y optimizado)	61
5.14.	Ic de CO para los tres casos	61
5.15.	Índice de concordancia de O ₃ para campo de vientos original y optimizado	65
5.16.	Ic para el O ₃ con campo de vientos original y optimizado	65
6.1.	Valores de la Métrica Exposición	79
6.2.	Valores de la Métrica Extensión	83
6.3.	Valores de la Métrica Severidad	83
B.1.	Factores de emisión	93
B.2.	Factores de emisión (cont.)	93
C.1.	Factores de agregación	94
C.2.	Perfiles de Emisión de Compuestos Orgánicos Volátiles	95
D.1.	Emisiones biogénicas	97

D.2. Especiación de emisiones biogénicas	98
--	----

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1. Metodología General	8
2.2. Cobertura Vegetal	10
2.3. Fuentes puntuales	11
2.4. Distribución temporal de emisiones puntuales	12
2.5. Emisiones de área	13
2.6. Emisiones de fuentes lineales	15
2.7. Especiación de emisiones	17
5.1. Topografía del área de estudio	32
5.2. Estaciones de la RAMA	33
5.3. Área de cobertura de los dominios	34
5.4. Sistema de alta presión caso 1	35
5.5. Sistema de alta presión caso 2	36
5.6. Sistema de alta presión caso 3	36
5.7. Caso 1: campo de viento y temperatura en superficie	38
5.8. Caso 2: campo de viento y temperatura en superficie	39
5.9. Caso 3: campo de viento y temperatura en superficie	40
5.10. Variación horaria de temperatura superficial del 29 de octubre al 1 de noviembre de 1996	41
5.11. Variación horaria de temperatura del 24 al 27 febrero 1997	42
5.12. Variación horaria de temperatura del 1 al 4 de marzo 1997	43
5.13. Variación horaria de magnitudes de viento superficiales del 29 de octubre al 1 de noviembre de 1996	44
5.14. Variación horaria de magnitudes de viento del 24 al 27 de febrero 1997	45
5.15. Variación horaria de magnitudes de viento del 1 al 4 de marzo 1997	46
5.16. Direcciones de viento del 29 de octubre al 1 de noviembre 1996	47
5.17. Dirección del viento del 24 al 27 de febrero 1997	48
5.18. Direcciones de viento del 1 al 4 de marzo 1997	49
5.19. Perfil vertical de temperatura y de magnitud de viento del 1 noviembre 1996	50
5.20. Perfil vertical de temperatura y magnitud de viento del 24 de febrero 1997	50

5.21. Perfil vertical de temperatura y magnitud de viento del 3 de marzo 1997	51
5.22. Magnitudes de vientos entre RAMA y MCCM	58
5.23. Gráficas de series de tiempo entre magnitudes de viento originales y optimizadas	59
5.24. Diagramas de dispersión de magnitudes de viento originales y optimizados	60
5.25. Diagramas de dispersión de concentraciones de CO	62
5.26. Diagramas de dispersión de concentraciones de O ₃	63
5.27. Variación horaria de concentraciones de O ₃ datos de RAMA, MCCM y MCCM con vientos modificados	64
6.1. Localización del Lago	67
6.2. Comparación de mediciones de O ₃ de la RAMA y del MCCM	69
6.3. Vientos debidos al lago virtual	70
6.4. Temperaturas con y sin lago	71
6.5. Promedio de temperatura superficial con lago.	72
6.6. Comparación de concentraciones de O ₃ con y sin lago.	72
6.7. Concentraciones superficiales de O ₃ con y sin lago.	73
6.8. Localización de las fuentes puntuales	75
6.9. Temperaturas y campo de vientos superficiales.	77
6.10. Concentraciones superficiales de O ₃ y NO ₂ con y sin fuente.	80
6.11. Concentraciones superficiales de NO ₂ con y sin fuente.	81
6.12. Exposición	82
6.13. Extensión	84
6.14. Severidad	85

RESUMEN

Se implementó el modelo postremo de calidad del aire *Multiscale Climate Chemistry Model*, desarrollado en el Instituto Fraunhofer en Alemania, cuya principal característica es el acoplamiento entre la química atmosférica con la meteorología. Es el primer modelo en su tipo que se aplica en México. La evaluación del modelo mostró que produce resultados superiores a los obtenidos por otros modelos utilizados en la región.

En presencia de sistemas de alta presión la existencia de cuerpos de agua inducen una reducción en las concentraciones de ozono y otros contaminantes debido al efecto de brisa agua-tierra. Este fenómeno se presenta principalmente en regiones cercanas al cuerpo de agua. En el caso de la regeneración del ex-lago de Texcoco las áreas de reducción de contaminantes comprenden zonas densamente pobladas. Las concentraciones máximas de ozono se reducen en más de un 10%. Los cuerpos de agua colocados estratégicamente producen un efecto benéfico en la calidad del aire por lo que se deben tomar en cuenta en la planeación urbana.

La eliminación de grandes emisiones de fuentes puntuales del sector energético como en Tula Hgo., puede inducir un incremento del 80% en la exposición potencial al ozono en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México. Esto muestra que medidas extremas de reducción de emisiones contaminantes pueden ser contraproducentes si no se efectúan en coordinación con la reducción de hidrocarburos.

Se generaron escenarios de emisiones adecuados para la modelación de la calidad del aire que incluyeron, por primera vez, emisiones biogénicas. Este trabajo permitirá realizar trabajos de planeación ambiental en la región.

ABSTRACT

The state of the art air quality model called Multiscale Climate Chemistry Model (MCCM), developed by the Fraunhofer Institute of Germany, has been implemented for the first time in the central region of Mexico. Its main characteristic is that it couples the meteorology and the photochemistry modules. The model was evaluated showing better results than other models used in the region.

During the presence of high pressure systems large water bodies near a metropolitan area, produce reductions in ozone and other pollutant concentrations levels near the shores. This is because of the generation of the water-land breeze. In the proposed recovery of Texcoco Lake largely populated areas are influenced by this effect. The maximum ozone concentrations are reduced by more than 10%. Strategically situated water bodies produce a beneficial effect in the air quality and should be taken into account in urban development planning.

The elimination of large point emissions of the energy sector, like the Tula complex, could induce an increment of about 80% in the potential exposition of ozone in the Metropolitan Zone of Mexico City, (MZMC). This shows that extreme measures of pollutant abatement could be counterproductive if they are not coordinated with hydrocarbon reductions.

Successful emission scenarios including, for the first time, biogenic emissions were developed in the process of the model implementation. This work will allow further studies for the environmental planning in the region.

1. INTRODUCCIÓN

La Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM) es el centro socioeconómico más importante del país con más de 18 millones de habitantes (INEGI, 2000), incluyendo comercios e industrias que general alrededor del 30 % del producto interno bruto además circulan alrededor de 3 millones de vehículos. Esta actividad económica, industrial y vehicular es responsable en gran parte de generar los elevados niveles de contaminación atmosférica en la región. Esta contaminación afecta otras ciudades y centros industriales aledaños, por lo que no basta tener un modelo local para su descripción. Es necesario conocer cómo la contaminación afecta al Valle de Cuernavaca y al de Toluca, donde se concentra otra parte importante de la población y de la actividad industrial del país.

Los modelos de calidad del aire a nivel regional se han convertido en una herramienta indispensable para el estudio de la contaminación atmosférica y la planeación urbana e industrial (Sistla et al., 1996; Morris et al., 1991). En el Centro de Ciencias de la Atmósfera y la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería de la UNAM, se han desarrollado y modificado modelos computacionales meteorológicos (Mossiopoulos, 1992; Luna, 1997; Fuentes et al., 1993), de transporte de contaminantes (Jazcilevich y Fuentes, 1974), de fotoquímica atmosférica (Ruiz et al., 1993b; García, 1997), de transferencia de radiación (Castro et al., 1997; Ruiz et al., 1993a). Lo anterior permite tanto desarrollar como evaluar modelos de calidad del aire.

Esta tesis tiene por objetivo el evaluar los efectos en la calidad del aire en la región centro de la República Mexicana originados por dos escenarios. La regeneración del ex-lago de Texcoco y la eliminación de emisiones provenientes del sector energético. Para efectuar dicha evaluación se requirió generar un escenario de emisiones e implementar el *Multiscale Climate Chemistry Model* (MCCM). El MCCM se desarrolló en el Instituto Fraunhofer (IFU) en Alemania, siendo en la actualidad una herramienta útil y flexible con la que es posible estudiar el fenómeno de contaminación atmosférica a nivel regional. Es el primer modelo de este tipo que se aplica en la región centro de la república Mexicana con la integración de datos de emisiones actuales y genera mejores resultados comparado con otros modelos (Williams et al., 1992) para reproducir los valores de concentraciones de ozono

Para emplear el MCCM se requiere tanto de datos meteorológicos como

de emisiones. Así, una buena descripción de la meteorología en la región y una adecuada especiación de las emisiones ayuda a obtener resultados de calidad del aire superiores a los alcanzados hasta la fecha y, gracias a esto, se pueden hacer aplicaciones como el cambio de uso de suelo en el ex-lago de Texcoco y la influencia del sector energético en la calidad del aire de la ciudad de México, cuyos resultados son importantes en la planeación urbana e industrial.

Aunque en la región se han usado modelos numéricos para analizar la calidad del aire (Williams et al., 1992), el modelo aquí presentado es el primero que cubre la región de la cuenca del Valle de México, de Cuernavaca y de Toluca. Dicho modelo es postrimero en el análisis de calidad del aire. El MCCM incluye como módulo de meteorología al Modelo de Mesoescala versión 5 (MM5) (Grell et al., 1994) acoplado al de fotoquímica para escalas regionales *Rain Acid Deposition Model version 2* (RADM2) (Stockwell et al., 1995). Para la descripción de los procesos de fotólisis se emplea un esquema de Delta Eddington basado en los trabajos de Joseph et al. (1976) y de Madronich (1987), incluye un módulo de transporte de humedad en suelos propuesto por Smirnova et al. (2000), emplea un esquema numérico de transporte de contaminantes de tercer orden (Smolarkiewicz y Grabowski, 1990). Para la simulación de la deposición de contaminantes utiliza una parametrización propuesta por Wesley (1989) y Erisman et al. (1994). La información de emisiones antropogénicas, provienen de inventarios anuales generados en el gobierno del Distrito Federal (DDF et al., 1995) y en el Instituto Nacional de Ecología (CAM, 2001), se incorpora mediante un procedimiento y un modelo desarrollados durante este trabajo; se incluyen las emisiones biogénicas (Seidl, 1998) y el código fuente se encuentra disponible a la comunidad.

Esta tesis consta de 7 capítulos y 4 apéndices. En el capítulo 2, se describen y se muestran las características de los inventarios de emisión, los compuestos químicos considerados, los tipos de fuentes de emisión, así como la resolución temporal y espacial de las emisiones. Se presentan los procedimientos de especiación y cálculo para generar el escenario de emisiones a emplearse en el MCCM. Estos procedimientos se pueden emplear en otros modelos del mismo tipo. En el capítulo 3 se describe las partes que componen al MCCM, como el modelo MM5 Penn State/NCAR *Mesoscale Model v5*; se describen en detalle los módulos adicionales de suelo-vegetación, química, fotólisis, emisiones biogénicas, y deposición seca; así como también se mencionan algunos aspectos computacionales del MCCM. En el capítulo 4 se describe el mecanismo fotoquímico *Rain Acid Deposition Model v2* (RADM2), los tipos de compuestos considerados tanto para la química orgánica como para la química inorgánica, las consideraciones para emplear las velocidades de reacción, y el procedimiento de agrupación de los compuestos del escenario de emisiones en dicho mecanismo. En el capítulo 5 se describe la región de estudio, los datos meteorológicos utilizados, la

estrategia de dominios anidados, los parámetros estadísticos para la evaluación del modelo; se presenta un estudio de sensibilidad de las concentraciones de ozono con respecto al campo de vientos empleado en el transporte de contaminantes y, finalmente, se presentan los resultados de la fotoquímica con un campo de viento modificado. En el capítulo 6 se muestran las aplicaciones del modelo en la región. Así se evalúa el posible efecto en la calidad del aire de la ZMVM por la regeneración del ex-lago de Texcoco y, en la segunda aplicación, por la eliminación de las emisiones de fuentes puntuales del sector energético. Las conclusiones se presentan en el capítulo 7. En los apéndices se presentan la definición de los parámetros estadísticos empleados, los factores de emisión para fuentes vehiculares y las tablas empleadas para la especiación de emisiones de fuentes antropogénicas y biogénicas.

2. ESCENARIO DE EMISIONES

2.1. Introducción

En la modelación de calidad del aire se requiere de conocer los contaminantes emitidos en la zona de estudio, con resoluciones espacial y horaria adecuadas al modelo. Para ello se utilizan los inventarios de emisiones anuales que abarcan un área específica y no contemplan la especiación de hidrocarburos. En la actualidad no existen inventarios de emisiones para modelos de calidad del aire disponibles para la región, por lo que la información proveniente de los inventarios que se encuentra en presentación y formato distintos a los empleados por el modelo de calidad del aire se procesó para poderse emplear en el MCCM.

En el presente capítulo se describen los compuestos, las bases de datos utilizadas, el procedimiento y las consideraciones empleadas para efectuar las modificaciones necesarias a los inventarios de emisiones con la finalidad de incluirse al modelo de calidad del aire MCCM.

2.2. Características del Escenario

2.2.1. Compuestos del Escenario

Los compuestos del escenario que se consideraron son principalmente los generados por las actividades del hombre (emisiones antropogénicas). También se consideraron fuentes biogénicas, principalmente bosques y pastizales. Para el caso de los Compuestos Orgánicos Volátiles (COV), no se obtuvieron datos de especies o compuestos individuales debido a su gran número. Solamente es necesario un grupo representativo de los mismos para obtener resultados razonables (ver Flassak et al , 1992; Middleton, 1987). Los compuestos provenientes de los inventario de emisiones son:

Monóxido de carbono	CO
Óxidos de nitrógeno	NO _x
Dióxido de azufre	SO ₂
Compuestos orgánicos volátiles	COV
Material particulado	MP

Los óxidos de nitrógeno se separan en monóxido de nitrógeno (NO) y bióxido de nitrógeno (NO₂) Los COV también se dividieron en varios

compuestos y se reagruparon según el modelo químico a emplear, el cual se explicará posteriormente.

En el presente trabajo, las emisiones de material particulado no se emplearon ya que esta versión de MCCM no las considera.

2.2.2. Clasificación de las Fuentes de Emisión.

Las emisiones se clasifican en dos clases dependiendo de su origen:

- Antropogénicas, debidas a las actividades del hombre.
- Biogénicas, principalmente generadas por los bosques.

Aunque la primera clase representa la principal contribución de emisiones, las de fuentes naturales también son generadoras importantes de las emisiones de COV (Lamb et al , 1987, ver)

Las emisiones antropogénicas se pueden subdividir de acuerdo a sus características geométricas. Así tenemos:

Fuentes puntuales, en donde grandes cantidades de contaminantes se emiten en un área pequeña. Entre éstas tenemos las fuentes estacionarias industriales como grandes fábricas (químicas, farmacéuticas, vidrieras, cementeras), plantas generadoras de energía, fundidoras, etc.

Fuentes lineales, consisten de las emisiones generadas por los vehículos en las vialidades.

Fuentes de área, emisiones que no se pueden localizar en un punto en específico y que abarcan una amplia distribución. No pertenecen a ninguna de las clasificaciones anteriores.

2.2.3. Método General

Se construyó una base de datos a partir de los inventarios para generar el escenario de emisiones utilizable por el MCCM. Ésta se realizó con información proporcionada por los diferentes organismos e instituciones nacionales: Instituto Nacional de Ecología (INE), Gobierno del Distrito Federal (GDF), Gobierno del Estado de México, Instituto Mexicano del Petróleo (IMP) y Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). La información recolectada posee diferentes formatos, unidades, áreas de cobertura, y con resoluciones espaciales y temporales distintas. Así se procesó esta información empleando el siguiente método: primero, se efectuó la distribución espacial de las emisiones de área y puntuales, localizándose en

el dominio de modelación; segundo, se distribuyeron en forma horaria dependiendo del tipo de fuente; tercero, se realizó la especiación para los COV y NO_x, redistribuyendo la emisión en los diferentes compuestos emitidos por tipo de fuente; en el caso de las fuentes lineales, la base de datos ya incluía una distribución espacial y temporal, por lo que sólo se requirió efectuar la especiación; finalmente, todo se agrupó en una base de datos en un formato tal que es compatible con el modelo MCCM. Un esquema de dicha metodología se muestra en la Figura 2.1.

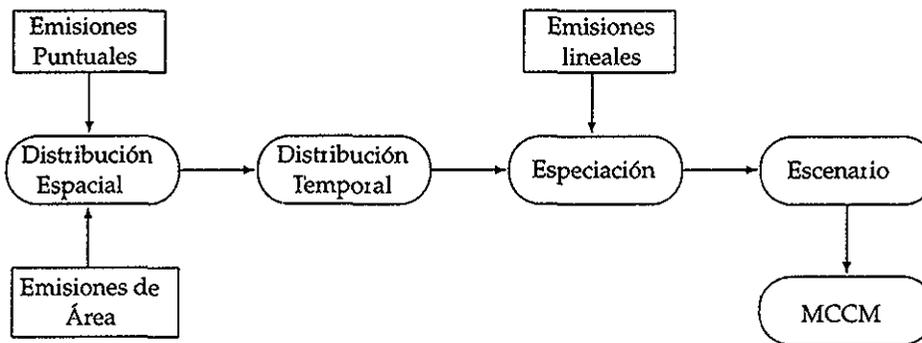


Fig. 2.1: Metodología general para la elaboración del escenario de emisiones.

2.2.4. Resolución Espacial y Temporal del Escenario

Se recopilaron varios inventarios de distintas fuentes de información que cubrían áreas con diferentes dimensiones y resolución. El inventario más importante es el de fuentes móviles. Por lo anterior se seleccionó la resolución espacial de este inventario para aplicarlo al resto de la base de datos de emisiones para modelación. La dimensión de la celda es de 2×2 km. Se escogió 1994 como el año de referencia debido a la disponibilidad de la información. Para elaborar el escenario de forma horaria, se emplearon dos procedimientos:

- 1 Para las categorías de emisión que incluyen las fuentes puntuales, bosques y fuentes de área, las emisiones horarias se calcularon con base en las emisiones anuales mediante el uso de funciones de distribución temporal a partir de las cuales se pueden calcular las emisiones mensuales, semanales, diarias y horarias
2. En el caso de las fuentes móviles, se desarrollaron cálculos directos para calcular las emisiones horarias empleando datos específicos de tráfico vehicular

2.3. Emisiones Biogénicas

Las emisiones biogénicas son hidrocarburos emitidos por las plantas. Para conocer la emisión se requiere de información sobre el tipo de vegetación que cubre el área de modelación. Así mismo, el tipo de vegetación se encuentra asociado al uso de suelo de la región por lo que se puede inferir la emisión a partir del uso de suelo.

Se realizó una actualización del tipo de uso de suelo con información proveniente del inventario nacional forestal generado en el Instituto de Geografía (SEMARNAP, 1994). Éste provee 33 categorías de uso de suelo las cuales se reagrupan en las 13 categorías de uso de suelo del MM5. Con lo anterior se mejora la resolución y descripción de uso de suelo en la región y por ende las emisiones biogénicas.

El cálculo y consideraciones para la estimación de las emisiones biogénicas se realizan en un módulo que se describe en el capítulo siguiente.

Clasificación de Uso de Suelo

Esta información se obtuvo de la base de datos generada en el Instituto de Geografía de la UNAM y es la misma base de datos que se empleó para la elaboración de inventario forestal nacional, las 33 diferentes categorías de uso de suelo se muestran en la Tabla 2.1

Tab. 2.1: Tipos de uso de suelo empleados

1	No clasificable	12	Mezquital	23	Urbano
2	Agua	13	Selva Baja	24	Selva Alta
3	Vegetación Halófila	14	Bosque tascate	25	Bosque de abies
4	Matorral micrófilo	15	Bosque encino	26	Bosque mesófilo de montaña
5	Matorral crasicale	16	Bosque Pino	27	Vegetación acuática
6	Matorral rosetófilo	17	Bosque Pino encino	28	Manglar
7	Pastizal	18	Bosque encino pino	29	Tundra alpina
8	Chaparral	19	Selva mediana	30	Matorral Espinoso
9	Matorral Sarcocaula	20	Agropecuaria	31	Sabana
10	Agricultura	21	Matorral halófilo	32	Pecuario
11	Matorral Subtropical	22	Matorral Montano	33	Selva mediana Subperenifolia

En la Figura 2.2 se observan los diferentes tipos de uso de suelo en la región de estudio empleados para alimentar al modelo.

2.4. Emisiones Antropogénicas

En esta sección se presenta la descripción de cada uno de los inventarios de fuentes antropogénicas y las modificaciones realizadas en cada uno de ellos a fin de construir una base de datos útil para un modelo de calidad del aire.

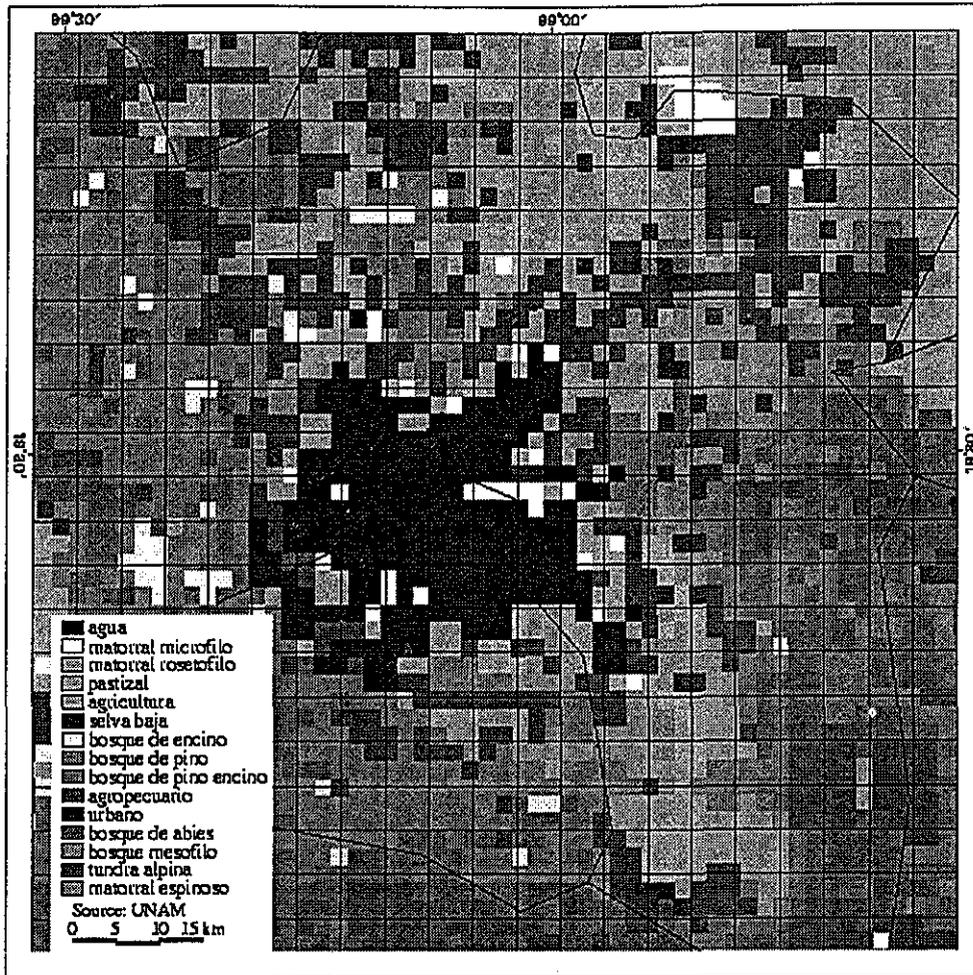


Fig. 2.2: Tipos de vegetación en el área de estudio

2.4.1. Fuentes Puntuales

En el inventario de fuentes puntuales se encuentran identificados los contaminantes y su tasa de descarga, que se emplea para evaluar las tendencias de contaminación en un área específica, como lo es el Distrito Federal. La base de datos empleada es el DATGEN generada y mantenida por el Instituto Nacional de Ecología (INE). Contempla alrededor de 3,229 fuentes en el Distrito Federal y 224 fuentes de los estados circundantes de Morelos, Puebla, Tlaxcala, Querétaro, Hidalgo y México. La información que se empleó de esta base de datos se muestra en la Tabla 2.2

Los tipos de fuentes puntuales que contempla la base de datos se presenta en la Tabla 2.3 y una representación de la ubicación de dichas fuentes se muestra en la Figura 2.3. Ya que se conoce la distribución espacial de estas fuentes de emisión, sólo se requirió realizar la distribución temporal.

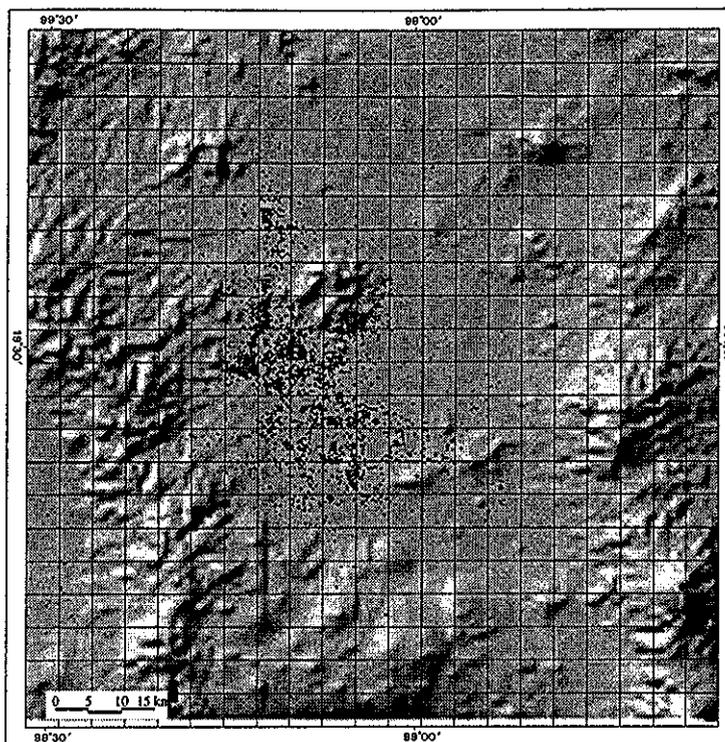


Fig. 2.3: Localización de las fuentes puntuales incluidas en el inventario

Tab. 2.2: Fuentes puntuales. Información empleada

Información	Unidades
Localización de la fuente	longitud, latitud
Altura de chimenea	m
Emisiones sin control de: Material particulado Oxidos de azufre Monóxido de carbono Oxidos de nitrógeno Hidrocarburos	ton/año
Tiempo de emisión	horas
Temperatura de salida	°C
Velocidad de salida	m/s

Tab. 2.3: Tipos de fuentes puntuales

Industria de procesos químicos	Industria minera
Industria alimentaria y agrícola	Industria federal
Industria metalúrgica	Industria del petróleo y gas

Debido a que no se conoce la distribución horaria de la emisiones durante el período de operación, se consideró una emisión constante durante dicho período. Así, la emisión anual se dividió entre el número de horas de operación anual con la finalidad de obtener la emisión en cada hora. Por ejemplo, para obtener la distribución temporal de las plantas que operan durante tres turnos (24 horas al día), sus emisiones diarias se multiplican por $\frac{1}{24}$, las que operan dos turnos (16 horas) por $\frac{1}{16}$ y las de un turno (8 horas) por $\frac{1}{8}$. Posteriormente la emisión de dicha fuente se distribuye sólo durante las horas de operación. Así tenemos que, para las que operan 8 horas, la emisión sólo se da entre las 8:00 y 16:00 hrs, y para las que operan 2 turnos su emisión va de 6:00 a 22:00 hrs. (ver Figura 2.4)

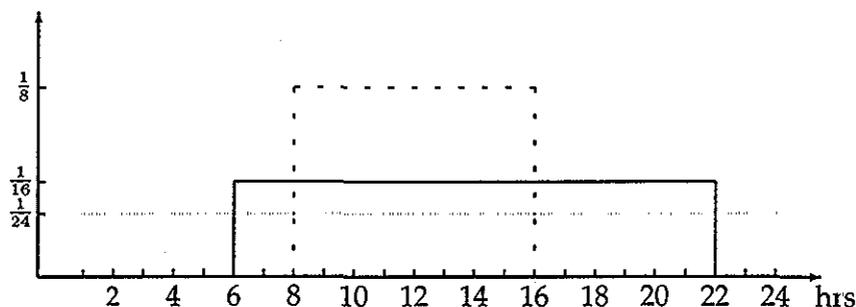


Fig. 2.4: Diagrama esquemático de la distribución temporal de emisiones puntuales durante el día. Para plantas que operan durante un turno (- - -), dos turnos (—) y operación continua (· · ·)

2.4.2. Emisiones de Área

El inventario de las emisiones de área sólo indica la emisión anual en la región de estudio. En este inventario se tienen las emisiones tanto de compuestos inorgánicos (SO_2 , NO_x), como de los COV. Este inventario se procesó para emplearse en el modelo. Como primer paso se requiere distribuir las emisiones en la región. Esto fue realizado por el GDF, empleando como referencia el número de habitantes por Área Geoestadística Básica, (AGEB), y considerando el nivel socioeconómico de cada una de éstas. Mediante un sistema de información geográfico (ArcInfo) las emisiones se asignaron a cada AGEB, para después redistribuirlas en una malla rectangular de 35×40 celdas de 2×2 km.

Con la información de emisión anual en cada celda de la malla, se procedió a realizar la distribución temporal de las emisiones para cada tipo de contaminante. Ésta se realiza por partes que van de emisión anual, a estacional y semanal. Posteriormente se obtiene la emisión diaria y, finalmente,

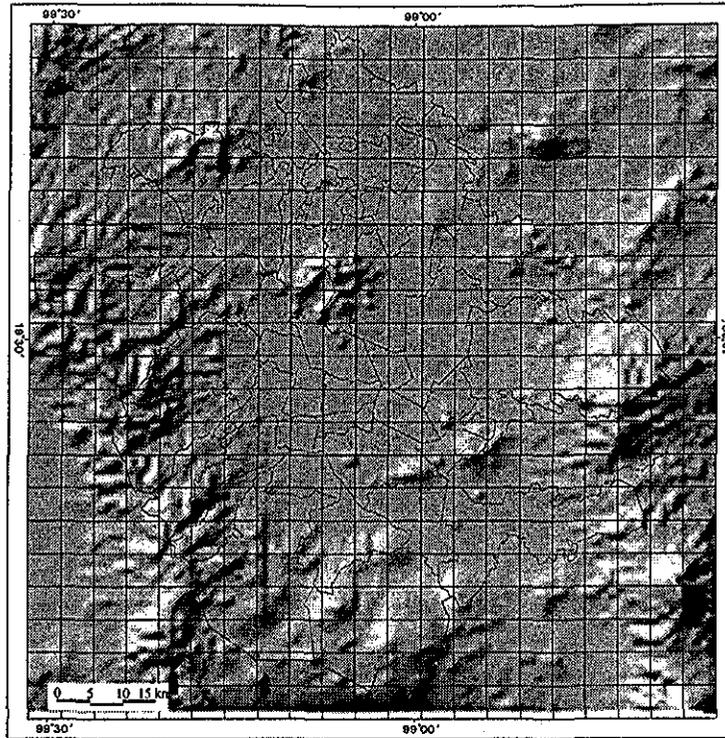


Fig. 2.5: Localización de emisiones de área

se distribuye la emisión de un día en específico de forma horaria. De esta manera tenemos que:

$$Ee_i = Fe_i \times E_a \quad (2.1)$$

$$Es_j = Fs_j \times Ee_i \quad (2.2)$$

$$Ed_k = Fd_k \times Es_j \quad (2.3)$$

$$Eh_l = Fh_l \times Ed_k \quad (2.4)$$

de lo anterior obtenemos:

$$E_h = Fh_l \times Fd_k \times Fs_j \times Fe_i \times E_a \quad (2.5)$$

donde

E_a — emisión anual

Ee_i — emisión de la estación i

Es_j — emisión de la semana j

Ed_k — emisión del día k

Eh_l — emisión en la hora l

y Fe_i, Fs_j, Fd_k, Fh_l son los factores de distribución de las emisiones por estación, semana, día y hora respectivamente.

Tab. 2.4: Distribución temporal de emisiones de área

Factor		Valor
F_{e_i}	$i=1,4$	$1/4$
F_{s_j}	$j=1,13$	$1/13$
F_{d_k}	$k=1,7$	$1/7$
F_{h_l}	$l=1,24$	$1/24$

Debido a la falta de información para distribuir temporalmente las emisiones, se consideró que éstas eran constantes a lo largo de todo el año. Como primera aproximación se emplearon los valores de la Tabla 2.4.

Así, tenemos como ejemplo: si la emisión de una fuente de área es de $E_a = 10,000$ ton/año, la emisión horaria E_h se calcularía a partir de la ecuación 2.5 de la siguiente forma:

$$E_h = \frac{1}{4} \times \frac{1}{13} \times \frac{1}{7} \times \frac{1}{24} \times E_a$$

entonces tenemos:

$$E_h = 1.14 \times 10^{-4} \times 10,000 \times \frac{1,000 \text{ kg}}{1 \text{ Ton}}$$

$$E_h = 1.14 \times 10^3 \text{ kg/hora}$$

2.4.3. Emisiones Móviles.

Las emisiones móviles provienen del TESUM (TÜV Emission Simulation Model) TÜV Rheinland Safety and Environmental Protection GmbH a partir de un estudio realizado de 1990 a 1993 (DDF et al., 1995), en donde se analizaron más de 11,000 sectores de vialidades en donde, para cada uno de éstos, se conoce el tipo de vehículo, el número de vehículos que se localizan en este sector, la velocidad en la que se desplazan y la longitud del sector. Estos datos se tienen para cada hora y para tres diferentes tipos de días: día laboral, sábado y domingo. Con la información anterior y el factor de emisión correspondiente al tipo de vehículo, se calcula la emisión de cada sector de vialidad. La emisión por vialidad se obtiene a partir de la siguiente ecuación:

$$E_{hkj} = n_{hij}(1 - f_h)F_jD_{ik} + n_{hij}f_hF'_jD_{ik} \quad (2.6)$$

Donde:

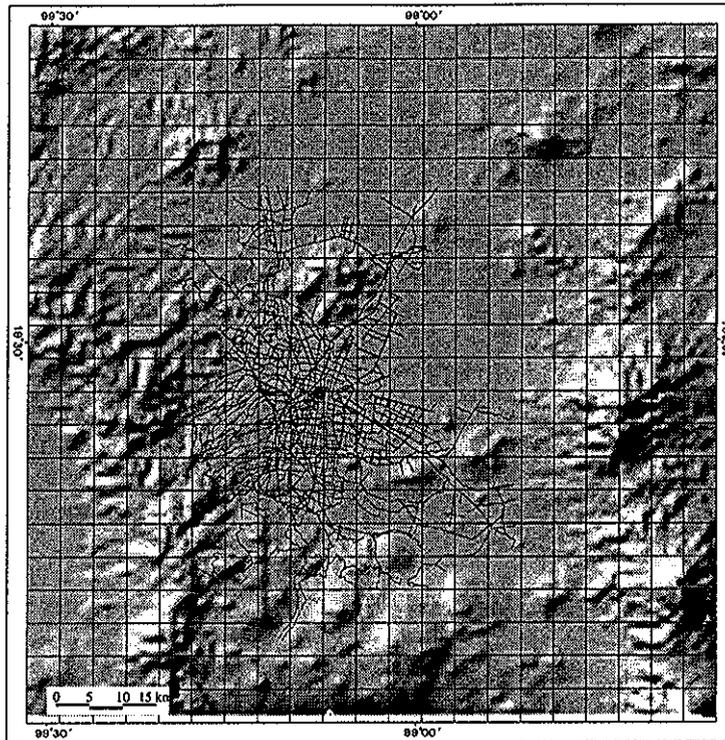


Fig. 2.6: Localización de emisiones móviles

- E_{hkj} Emisión en el segmento k de la vialidad i a la hora h del vehículo tipo j
 n_{hij} Número de vehículos tipo j en la vialidad i a la hora h
 f_h Fracción de vehículos en frío que circula a la hora h
 F_j, F'_j Factor de emisión de vehículos tipo j en caliente y en frío. Este es función de la velocidad del vehículo.
 D_{ki} Longitud del segmento k de la vialidad i

La emisión por celda se calcula de la siguiente forma:

$$E_{nh} = \sum_{k=1}^{m_n} \sum_{j=1}^l E_{hkj} \quad (2.7)$$

donde:

- E_{nh} Emisión en la celda n a la hora h [$\text{kg}/\text{h}^{-1}\text{km}^{-2}$]
 E_{hkj} Emisión en el segmento k de la vialidad i a la hora h del vehículo tipo j [kg/h]
 k Índice de segmentos en la celda n
 m_n Número de segmentos en la celda n
 j Tipo de vehículo
 l Número de tipo de vehículos

Los factores de emisión por tipo de vehículo y en función de la velocidad se presentan a en la Tabla B.1. Esos factores fueron calculados para la flota vehicular de 1990 empleando el modelo de emisiones vehiculares Mobile4 (EPA, 1998) por el GDF.

En el estudio del IUV se realizó la captura y digitalización de las diferentes vialidades en la región de estudio. Posteriormente, mediante un sistema de información geográfico, se posicionó sobre el área una malla de 952 celdas de 2×2 km. De ahí se obtuvieron los segmentos de las vialidades para cada celda; así tenemos que para cada celda se encuentran varios sectores de diferentes vialidades, los cuales contribuyen a la emisión que se obtiene de dicha celda. Conociendo los sectores que se tienen en cada celda y su emisión, se obtiene la emisión en cada celda para cada hora, (ver Ecuación 2.7). Como dichas emisiones se encuentran distribuidas en el espacio y en el tiempo, no se requiere de hacer modificaciones mayores a los datos de estas emisiones.

2.5. Especiación de Emisiones

Las emisiones de hidrocarburos provenientes de las diferentes fuentes de emisión sólo reportan hidrocarburos totales. Por otro lado, el modelo fotoquímico RADM2 emplea grupos de compuestos químicos con reactividad similar respecto al radical $\bullet\text{OH}$. A estos grupos se les conoce como clases RADM (ver Tabla C.1). Por lo anterior, se requiere procesar los inventarios de emisiones de hidrocarburos para poderse suministrar al modelo fotoquímico. Para ello se empleó el siguiente procedimiento de procesamiento de emisiones del inventario:

1. Distribución de la emisiones en las diferentes categorías de emisión.
2. Cada categoría de emisión se distribuye en los compuestos químicos que emite.
3. Una vez que se han distribuido todas las fuentes de emisión, en los diferentes compuestos químicos, se procede a agruparlos en las diferentes clases RADM2.

La distribución de las emisiones de fuentes móviles, de área y puntuales en las diferentes categorías se realizó con base en la información proporcionada en el PROAIRE 1995-2000 (DDF, 1995), donde se especifica la distribución de las emisiones por sector. En el caso de fuentes móviles las categorías de emisión fueron por gasolina y diesel. Para fuentes de área se consideraron tres categorías que son combustión residencial, vapores provenientes de gasolineras y por el empleo del uso de solventes. Las fuentes puntuales se separan en dos categorías; una de procesos químicos y otra de emisión por refineries.

Posteriormente, la emisión de cada categoría se distribuye en las diferentes especies químicas. Debido a que para México no existe un perfil de emisiones por categoría de emisión se empleó como base el perfil de emisiones (Velt, 1989) (ver Tabla C 2), en donde se tiene un total de 38 diferentes compuestos químicos para siete diferentes categorías de emisión.

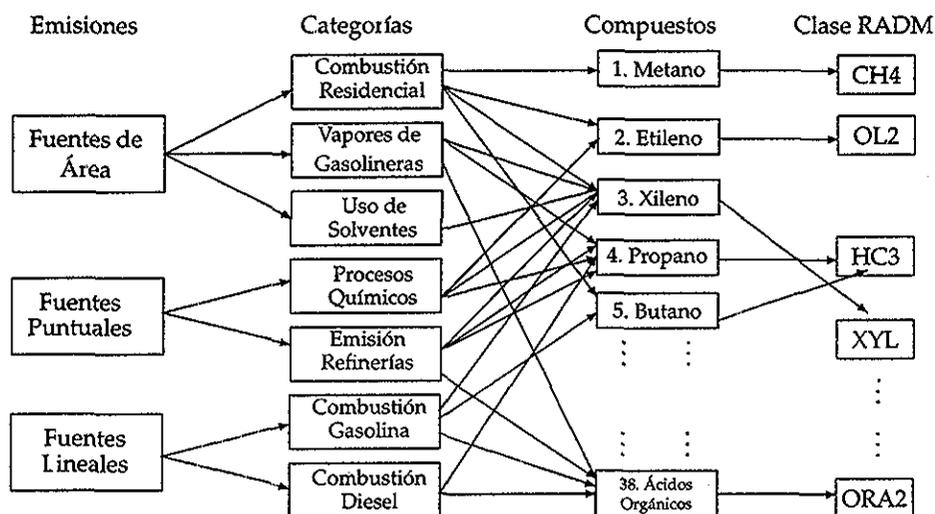


Fig. 2.7: Esquema de especiación de emisiones del inventario en las diferentes clases RADM. Primero se distribuyen las emisiones de cada fuente en las diferentes categorías, cada categoría emite diferentes compuestos químicos que posteriormente se agrupan según su estructura y reactividad en cada clase RADM.

La agrupación de los diferentes compuestos químicos en clases RADM (Middleton, 1987) se realizó conforme a la agrupación mostrada en la Tabla C.1, en donde los compuestos se reagrupan en 16 clases del mecanismo RADM. Si se desea emplear otro mecanismo químico sólo se requiere de modificar la forma como se agrupan los compuestos para que este inventario sea útil. Un esquema general de cómo se distribuyeron las emisiones de las diferentes fuentes y posteriormente se agruparon en las clases del modelo RADM se presenta en la Figura 2.7

2.6. Discusión

Se recopiló información de diferentes fuentes para generar una base de datos de emisiones útil para el modelo de calidad del aire MCCM.

Aunque el flujo de emisiones puntuales y de área durante el período de operación de cada proceso o sector se consideró constante, esto no ejerce una influencia importante dentro del inventario, ya que alrededor del 70 %

proviene de fuentes móviles. Por otro lado se requiere efectuar estudios para poder obtener las distribuciones temporales de este tipo de fuentes de emisión.

A partir de la información de fuentes móviles se pudo obtener una resolución aceptable temporal de una hora y espacial de 2×2 km.

Con base en la información sobre especies químicas emitidas por sector, giro industrial y combustible utilizado, se efectuó la especiación de las emisiones, que se reagruparon en las diferentes clases del mecanismo RADM empleando los factores de agregación propuestos por Middleton (1987).

3. DESCRIPCIÓN DE MCCM

La calidad del aire regional se determina por efectos de gran escala, como la situación sinóptica o el transporte de masas de aire con especies químicas específicas, así como también por procesos a pequeña escala. Por esta razón modelar la calidad de aire de forma regional requiere de un modelo a multiescalas. Por lo que tiene sentido el resolver áreas a gran escala con celdas grandes y con resolución fina en las áreas de interés para obtener una buena descripción en el área de estudio. Esto requiere de la capacidad de anidamientos múltiples para identificar problemas locales con resoluciones menores a 8 km. Un modelo meteorológico que posee estas características es el Modelo a Mesoescala de quinta generación de Penn State/NCAR (MM5) (Grell et al., 1994). En el MCCM todas las capacidades del modelo meteorológico se conservan. Puede utilizarse en forma hidrostática y no-hidrostática (Dudhia, 1993) y tiene capacidades de asimilación de datos en cuatro dimensiones (ADCD), tanto de análisis como de observaciones (Stauffer y Seaman, 1994). Además es posible inicializar MM5 con los mejores datos de entrada (Zou et al., 1995). Se puede emplear la capacidad de anidamiento de forma unidireccional o bidireccional en sus diferentes niveles. Posee parametrizaciones microfísicas que permiten diferentes niveles de sofisticación. A continuación se describirán los componentes de la química, algunos cambios realizados por los autores de MCCM y se discutirán algunas de las propiedades.

3.1. Dinámica

MM5v2 es un modelo no hidrostático que emplea completamente la ecuación de continuidad de masa compresible. El único término que no considera es el conjunto de ecuaciones del término de calentamiento adiabático que contribuye a la ecuación de tendencia de presión. Como una consecuencia, el marco de la dinámica permite el uso del modelo a resoluciones muy bajas (escala de nubes). Horizontalmente, todas las ecuaciones del modelo se encuentran tanto en coordenadas Lambert conformales, estereográfico polares o proyección Mercator. Esto permite al modelo aplicarse en cualquier parte del mundo. Las coordenadas verticales siguen el contor-

no del terreno, σ , y están definidas como:

$$\sigma = \frac{p_0 - p_t}{p_s - p_t}, \quad (3.1)$$

donde p_0 es la presión de referencia que depende solamente de un estado de referencia constante, p_t es la presión en la altura tope del modelo, y p_s es la presión en la superficie. Debido a que ni p_t ni p_s cambian con el tiempo σ es constante en el tiempo y da un estado de referencia.

Para simular el transporte de contaminantes se emplea la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho^* C) = & -m^2 \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho^* \frac{u}{m} C \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho^* \frac{v}{m} C \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial \sigma} (\rho^* \dot{\sigma} C) \\ & + Cm^2 \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho^* \frac{u}{m} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho^* \frac{v}{m} \right) + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\rho^* \frac{\dot{\sigma}}{m} \right) \right] \\ & + \rho^* Q \end{aligned} \quad (3.2)$$

El tercer término a la derecha es el término de divergencia que sólo aparece en la versión no hidrostática del modelo. ρ^* es $\rho_s - \rho_t$, $C = \rho_c / \rho$, donde ρ_c puede ser la densidad de una especie química, hielo, agua de lluvia, nieve o agua de nube. El factor de escala m (factor de mapa) que proviene de la transformación de coordenadas horizontales. Los componentes del viento en este sistema son u , v y $\dot{\sigma}$, el término de producción volumétrica ρQ .

$$\dot{\sigma} = \frac{\rho_0 g}{\rho^*} w - \frac{m\sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} u - \frac{m\sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial y} v \quad (3.3)$$

La densidad de referencia del aire ρ_0 , y ρ , la densidad del aire se relacionan mediante:

$$\rho(x, y, z, t) = \rho_0(z) + \rho'(x, y, z, t) \quad (3.4)$$

3.2. Transporte Turbulento en la Capa Límite (PBL)

Existen diferentes parametrizaciones en MM5 para el transporte turbulento en la capa límite. Debido a que el esfuerzo humano para acoplar la química con cada una de éstas sería enorme sólo se integra a la parametrización de segundo orden, de nivel 3 (Burk y Thompson, 1989). Este esquema requiere del cálculo de cuatro variables de pronóstico adicionales. Éstas son la energía cinética turbulenta q^2 , la varianza de la temperatura potencial del agua líquida $\overline{\theta_1'^2}$, la varianza de la humedad total $\overline{q_w'^2}$ y la covarianza de la temperatura potencial del agua líquida sobre la humedad total $\overline{\theta_1'^2 q_w'}$.

En el transporte de contaminantes se sigue la parametrización (teoría K) para el transporte turbulento de calor y humedad empleando:

$$-\overline{w'C'} = K_h \frac{\partial C}{\partial z} \quad (3.5)$$

Durante el transporte turbulento se tiene una complicación adicional, el cual ocurre cuando las reacciones químicas poseen una escala de tiempo de reacción menor que la escala de tiempo del transporte de los contaminantes. Durante el día en la capa superficial la escala de tiempo del transporte turbulento es suficientemente pequeña para despreciar este efecto, pero puede ser importante en la capa convectiva arriba de la capa superficial (Hamba, 1993).

3.3. Parametrización Multicapas de Suelo/Vegetación

La parametrización de turbulencia descrita anteriormente se expandió para incluir una parametrización de suelo/vegetación (Smirnova et al., 1997, 2000).

Este esquema de suelo/vegetación calcula la temperatura del suelo y la estratificación de la humedad en cinco capas, además determina los flujos de calor y de humedad en la interfase entre el suelo y la atmósfera. Para superficies con vegetación se consideran la evapotranspiración, la interceptación y la re-evaporación de la precipitación. Emplea un modelo simple para calcular la acumulación y derretimiento de la cobertura de nieve. Además calcula el efecto de la transferencia de calor y de agua en el suelo, tanto hacia la capa de vegetación como a la atmósfera.

El modelo de suelo se basa en las ecuaciones unidimensionales de conservación para temperatura (T_s) y humedad del suelo (η). Esas ecuaciones son:

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\gamma_s}{\rho_s L_s} \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) \quad (3.6)$$

y

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_\eta \frac{\partial \eta_s}{\partial z} \right) + \frac{\partial K_\eta}{\partial z} \quad (3.7)$$

donde ρ_s , L_s , γ_s , D_η y K_η son la densidad del suelo, la capacidad calorífica específica, la conductividad térmica, la conductividad difusiva y la conductividad hidráulica, respectivamente. La capacidad térmica volumétrica $\rho_s L_s$ y las conductividades se calculan a partir de los parámetros del suelo prescritos y del contenido de humedad actual. Para balancear los flujos de energía y de agua en la interfase entre el suelo y la atmósfera se emplean un conjunto extra de ecuaciones. Las cuales consideran las características del suelo, la evaporación de la cobertura vegetal, el flujo de radiación, los flujos atmosféricos de humedad, el flujo de infiltración de agua, entre otras.

Así mismo considera otro conjunto de ecuaciones donde se evalúa el contenido de humedad almacenada en la vegetación.

3.4. Química en la Fase Gaseosa

El MCCM puede emplear el mecanismo químico *Rain Acid Deposition Model* version 2 (RADM2) y el *Regional Atmospheric Chemistry Mechanism* (RACM) (Stockwell et al., 1997). En este trabajo se empleó el RADM2 que incluye 14 especies estables inorgánicas, 4 intermediarios reactivos y 3 especies abundantes estables (oxígeno, nitrógeno y agua). La química orgánica la representan 26 especies estables y 16 radicales peroxi. El mecanismo RADM2 emplea la aproximación de reactividad agregada molecular (Middleton et al., 1990), donde se agrupan compuestos orgánicos similares en especies del modelo mediante el empleo de un peso por su reactividad con el radical HO. Los factores de agregación para los compuestos más comunes son obtenidos de Middleton et al. (1990). La solución numérica emplea el método de la aproximación del estado cuasi estable (QSSA) con 22 especies diagnosticadas, 3 constantes y 38 calculada. Se emplea un esquema euleriano retrasado en el tiempo para resolver las ecuaciones de las 38 especies que se predicen.

Una descripción más detallada del mecanismo RADM2 se presenta en el siguiente capítulo.

3.5. Frecuencias de Fotólisis

Las frecuencias de fotólisis de las 21 reacciones fotoquímicas de fase gaseosa se calculan en cada punto de acuerdo a Madronich (1987). La frecuencia de fotólisis del gas i , J_i , es dada por la integral de la producción del flujo actínico $I_A(\lambda)$, la sección transversal de absorción $\sigma_i(\lambda)$ y los campos cuánticos $\phi_i(\lambda)$ sobre la longitud de onda λ :

$$J_i = \int_{\lambda_a}^{\lambda_c} I_A(\lambda) \cdot \sigma_i(\lambda) \cdot \phi_i(\lambda) d\lambda \quad (3.8)$$

Para calcular el flujo actínico se emplea un modelo de transferencia radiativa de Wiscome, que se basa en una técnica de delta-Eddington (Joseph et al., 1976). Este modelo de transferencia radiativa considera la absorción por O_2 y O_3 , la dispersión de Rayleigh, dispersión y absorción por partículas en aerosol y nubes (Chang et al., 1987). La ecuación 3.8 se resuelve para 130 longitudes de onda entre 186 y 730 nm.

Los perfiles del flujo actínico se calculan para cada punto de malla del dominio. Para la determinación de las secciones transversales de absorción

y dispersión se emplean los valores generados por MM5 para la temperatura, ozono y agua líquida de nube. Se pueden incluir los perfiles de ozono total provenientes del satélite TOMS.

El cálculo de las frecuencias de fotólisis tiene la ventaja de actualizar a las variables que dependen de la temperatura. El efecto de la temperatura, en el valor de las frecuencias de fotólisis, pueden inducir una variación en más de 1 % por grado de diferencia en la temperatura (Ruggaber et al., 1994, 1995)

3.6. Emisiones Biogénicas

La vegetación emite compuestos orgánicos. Dichos compuestos contribuyen considerablemente en la formación de ozono, especialmente durante los días calurosos del verano, debido a que la emisión se incrementa con la temperatura. El modelo MCCM contiene un módulo de emisiones biogénicas (Guenther et al., 1993, 1994; Simpson et al., 1995; Schoenemeyer et al., 1997). El módulo trata de forma separada las emisiones de isopreno, monoterpenos y otros compuestos orgánicos volátiles biogénicos (OCOV), respectivamente, así como también calcula emisiones de óxidos de nitrógeno del suelo. Para emplearse en el módulo de fotoquímica RADM2, las emisiones de monoterpenos y OCOV se deben desagregar en las clases RADM.

La estimación de emisiones biogénicas se basa en el procedimiento y consideración descritas por Seidl (1998) en el apéndice D. Ahí mismo se muestra el procedimiento de desagregación en las diferentes clases RADM.

3.7. Deposición Seca

El flujo de gases traza y partículas de la atmósfera a la superficie se calcula multiplicando sus concentraciones en la capa inferior del modelo por su velocidad de deposición, v_d , que es proporcional a la suma de tres resistencias características:

$$v_d = \frac{1}{(\tau_a + \tau_b + \tau_s)} \quad (3.9)$$

donde τ_a es la resistencia aerodinámica que depende de la rugosidad de la superficie y la estabilidad atmosférica, y τ_b es la resistencia de la subcapa en la proximidad de la superficie. El acoplamiento con las parametrizaciones de turbulencia produce una gran dependencia de τ_a con los datos de uso y tipo de suelo.

La resistencia de la superficie, τ_s , se determina empleando una parametrización desarrollada por Wesley (1989), donde considera las resistencias

de las superficies del suelo y plantas. Las propiedades de las plantas se determinan a partir del uso de suelo y de la estación anual.

La deposición seca del sulfato se describe de forma diferente. El sulfato presente en forma de partículas de aerosol se deposita de acuerdo con Erisman et al. (1994).

3.8. Procedimientos Numéricos y Aspectos Computacionales

La formulación de las diferencias finitas del modelo emplean las aproximaciones centradas en tiempo y espacio y un esquema semi implícito (Klemp y Wilhelmson, 1978) para el tratamiento de las ondas acústicas rápidas. Esto significa que los términos involucrados directamente con la parte acústica se separan de los términos que varían lentamente y se integran en pasos de tiempo cortos. El esquema semi-implícito trata la propagación vertical de las ondas sonoras implícitamente, permitiendo un paso de tiempo corto independiente de la resolución vertical del modelo, mientras que la propagación horizontal de las ondas sonoras se integra explícitamente.

Para la integración de la ecuación de advección, MM5 usa una diferenciación de segundo orden centrada con un esquema de integración de *salto de rana*. Aunque este es un sistema de integración robusto, no es útil para describir el transporte de contaminantes. Es muy difusivo y no positivo definido, por lo que se emplea un esquema monotónico, positivo definido en tres dimensiones (Smolarkiewicz y Grabowski, 1990). Este esquema de advección puede emplearse para las variables de humedad de MM5. Debido a que el criterio de estabilidad para la advección de compuestos traza es menos estricto que para la parte dinámica del modelo (momentum, temperatura y presión), el paso de tiempo para la advección del compuesto traza puede ser muy largo en resoluciones horizontales grandes.

El integrador del mecanismo químico posee su propio regulador de paso de tiempo. Sin embargo el paso de tiempo para la advección es muy grande para el de la química, que se resuelve para varios paso de tiempo en un paso de tiempo de advección. Dependiendo de las condiciones químicas, el paso de tiempo puede ser tan pequeño como 3 segundos.

Las condiciones de frontera incorporan las condiciones de frontera radiativa (Klemp y Durran, 1983) para la parte superior del modelo y un esquema de relajación (Perkey y Kreitzberg, 1976) para las fronteras laterales. Las variables de humedad y las especies químicas tiene un gradiente cero en las fronteras al salir.

Las modelaciones se realizaron en un equipo con procesador 'Alpha' a 667 MHz, bajo el ambiente UNIX. Se efectuaron modificaciones para hacerlo compatible con la arquitectura 'Alpha'. Se requieren 24 horas para 72 horas de modelación con química de un dominio de $40 \times 52 \times 23$.

4. MÓDULO QUÍMICO

4.1. Introducción

Uno de los componentes más importantes de cualquier modelo de calidad del aire regional es el mecanismo químico de la fase gaseosa. Las velocidades de reacción, las emisiones, el transporte y la deposición, determinan la distribución de las especies químicas en esta fase.

En las nubes las reacciones en la fase acuosa son las que contribuyen más en la acidificación de la atmósfera, por lo que es muy importante que el mecanismo de la fase gaseosa prediga correctamente las concentraciones de las especies que se necesitan para la química de la fase acuosa.

Las velocidades de oxidación en la fase acuosa dependen de las concentraciones, la solubilidad y la velocidad de transferencia de masa de agentes oxidantes tales como el peróxido de hidrógeno, ozono, ácido peroxi acético y los radicales hidroxilo (HO) y peroxi (HO₂).

Para producir una descripción exacta de las transformaciones químicas en la atmósfera, los modelos de calidad del aire deben incluir un mecanismo químico que incorpore todas las reacciones químicas significativas. Sin embargo, tal mecanismo debe ser simple en comparación con la química compleja de la atmósfera. Se requiere de esto último para evitar un consumo excesivo de recursos computacionales.

Los mecanismos de química atmosférica varían desde los muy explícitos que tratan todas las especies y reacciones químicas de manera individual a los mecanismos simplificados con especies sustitutas que representan un grupo de especies individuales. Ejemplos de mecanismos explícitos (Niki et al., 1972; Demerjian et al., 1974; Atkinson y Lloyd, 1984; Leone y Seinfeld, 1985; Kerr y Calvert, 1982; Carter, 1990). La fuente principal de la complejidad de los mecanismos es la química orgánica. El manejo de la química orgánica en la troposfera requiere de cientos de especies y reacciones (Calvert y Madronich, 1987). Se han desarrollado tres técnicas de agrupamiento para simplificar la química troposférica:

Especies sustitutas (Dodge, 1977). Se seleccionan una o varias especies químicas reales como representativas de una clase. La especie representativa para las reacciones de alcanos es el n-butano; para olefinas, el propeno y el *trans*-2-buteno; para los aldehídos, el acetaldehído; y para los hidrocarburos aromáticos, el benceno, tolueno y xilenos.

Estructuras agrupadas (Whitten et al., 1980, 1985; Killus y Whitten, 1982; Gery et al., 1989). Las moléculas se asocian de acuerdo al tipo de enlace del carbono (C). Este método trata a los átomos de C con enlace similar sin considerar el tipo de molécula a la que pertenecen. La forma más simple designa cuatro tipos de átomos de C

C-C incluye alcanos y enlaces simples en alquenos (PAR).

C=C alquenos, principalmente (OLE).

C=C anillos aromáticos con tres dobles enlaces (ARO).

>C=O carbonilos (CAR)

Con esta clasificación el propeno ($\text{CH}_3\text{-CH=CH}_2$) posee 1 PAR y 1 OLE.

Moléculas agrupadas (Schere y Demerjian, 1984; Penner y Watson, 1982; Atkinson et al., 1982; Stockwell, 1986). Todas las especies químicas similares se representan mediante una especie prototipo la cual es la que reacciona.

El RADM2 es el mecanismo químico empleado en el MCCM que representa la química orgánica mediante la técnica de moléculas agrupadas. Contiene parametrizaciones de varios procesos químicos importantes incluye tres clases de alcanos superiores, un tratamiento detallado de la química de los aromáticos; dos clases de alcanos superiores que representan los alquenos terminales e intermedios; manejo de cetonas y especies de dicarbonilos como clases diferentes a las de los aldehídos; inclusión de isopreno como especie explícita; y un tratamiento detallado de las reacciones de radicales peroxi.

El RADM2 se ha evaluado y revisado contra cámaras de esmog (Stockwell et al., 1995), donde se muestra que este mecanismo puede reproducir la química atmosférica regional adecuadamente.

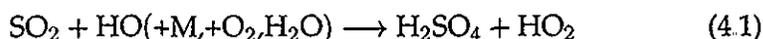
4.2. Química Inorgánica

La mayoría de las reacciones inorgánicas con velocidades constantes en el RADM2 (DeMore et al., 1988). Dentro del mecanismo se considera la reacción del OH con el HO_2 , que es un canal importante de terminación de los radicales HO_x . El modelo posee un tratamiento extensivo de la química del NO_3 debido a su importancia durante la química nocturna. Sin embargo, CO_2 y H_2 no se incluyen.

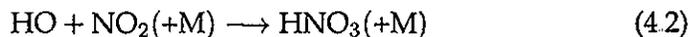
La química inorgánica del ozono, nitrógeno y sustancias con azufre bajo condiciones troposféricas es bien conocida. El ozono transportado a la troposfera de la estratosfera o generado localmente en la troposfera se fotoliza produciendo un átomo de oxígeno excitado en el estado O^1D . Una

fracción de los átomos O^1D se desactiva por colisiones con oxígeno o nitrógeno para producir átomos O^3P y la fracción remanente reacciona con H_2O para producir el radical hidróxido (HO). El HO reacciona tanto con especies orgánicas como con inorgánicas. La reacción del HO con el CO produce radicales HO_2 , que así mismo reaccionan con el NO para convertirlo a NO_2 . El HO reacciona consigo mismo para producir el peróxido de hidrógeno, o reacciona con otros radicales peroxi orgánicos para producir peróxidos orgánicos. La cadena se completa a través de la fotólisis del NO_2 que produce ozono.

Las reacciones de HO con SO_2 y con NO_2 son las mayores fuentes en fase gaseosa de H_2SO_4 y HNO_3 , respectivamente (Calvert y Stockwell, 1984). El dióxido de azufre reacciona con el HO de la siguiente forma:



La química diurna de la formación del HNO_3 se conoce bien, el HO se adiciona al NO_2 para dar HNO_3 como se muestra en:



La constante de rapidez para la reacción (4.2) es 10 veces mayor que la constante para la reacción (4.1) en las condiciones típicas de presión y temperatura. La producción de ácido nítrico a través de la química de fase gaseosa es un proceso muy importante de pérdida de NO_x .

La química nocturna de la formación del HNO_3 es más complicada, ya que incluye varias reacciones que involucran el radical NO_3 con varias especies, particularmente aldehídos, y se generan otras especies reactivas como el nitrato de peroxiacilo y HO_2 , que reaccionan con las emisiones de óxido de nitrógeno. Esto genera una pequeña fuente de radicales HO durante la noche.

4.3. Química Orgánica

Cientos de compuestos orgánicos volátiles (COV) se emiten a la atmósfera. Debido a que son muchos compuestos orgánicos, éstos se agrupan en conjuntos manejables de clases de COV basado en sus similitudes de reactividad oxidativa y sus magnitudes de emisión (Middleton et al., 1990). Cada categoría de COV se representa por varias especies modelo que abarcan el intervalo de reactividad. La mayoría de los COV se agrupan en especies sustitutas de reactividad y peso molecular similar, sin embargo los compuestos orgánicos emitidos en grandes cantidades se tratan como especies separadas en el modelo.

La reactividad pesada del RADM2 considera que el efecto de las emisiones de COV en los resultados de la modelación es aproximadamente

proporcional a la cantidad del compuesto que reacciona por día. Así, la emisión de un compuesto se puede representar por una especie del modelo, la cual reacciona a una velocidad diferente aplicándole un factor de peso al compuesto emitido. Dicho factor es la relación de la fracción del compuesto emitido que reacciona con la fracción de la especie del modelo que reacciona:

$$F = \frac{1 - \exp\left(-k_{\text{HO Emit}} \times \int [\text{HO}] dt\right)}{1 - \exp\left(-k_{\text{HO Modelo}} \times \int [\text{HO}] dt\right)} \quad (4.3)$$

El $k_{\text{HO Emit}}$ es la constante de velocidad de la reacción del HO con el compuesto individual, $k_{\text{HO Modelo}}$ es la constante de reacción del HO con la especie en el modelo RADM2, y el término $\int [\text{HO}] dt$ es la concentración integrada promedio diaria del radical HO.

En el RADM2 se agregaron cientos de COV en 15 clases de especies orgánicas reactivas. Los alcanos son especies muy importantes que se deben tratar en la fase gas de los mecanismos empleados en modelos regionales. Ya que dichos compuestos se pueden transportar grandes distancias, reaccionan con relativa lentitud con el radical HO y poseen velocidades de deposición bajas.

Los alcanos reaccionan con el radical HO para producir radicales peroxi (RO_2), los cuales reaccionan con NO, HO_2 y otros radicales orgánicos peroxi. Los alcanos más reactivos son los HC5 y HC8 que, cuando reaccionan con el HO, mediante ciclos adicionales de reacciones de peróxidos orgánicos oxidan el NO a NO_2 . Existe una gran cantidad de reacciones de los compuestos agrupados en las clases HC5 y HC8 que para fines prácticos no se pueden detallar. Así que se emplea el radical operacional XO_2 (grupo de compuestos agrupados que interviene en conversiones de NO a NO_2). La reacción del HO con el HC3 no producen radicales XO_2 , y los alcoholes se condensan en grupo HC3, ya que producen radicales alcohoxi y no peroxi.

Los aldehídos y cetonas se producen cuando los radicales peroxi orgánicos reaccionan con el NO. Éstos son representados por HCHO (formaldehído), ALD (acetaldehído y aldehídos superiores) y KET (acetona, metil etil cetona y cetonas superiores). Debido a que las cetonas son menos reactivas que los aldehídos, éstas representan un sumidero de carbón y son transportadas grandes distancias. Por lo anterior las cetonas se incluyen en el RADM2 (Tabla 4.1).

Los alquenos son constituyentes importantes en la troposfera urbana y rural. Son especies muy reactivas que poseen una constante alta de reacción con el radical HO, y reaccionan con el ozono para producir aldehídos e intermediarios Criegee altamente reactivos. Debido a la alta reactividad de los alquenos naturales y antropogénicos, los cambios en sus concentraciones relativas pueden conducir a grandes cambios en la reactividad total

Tab. 4.1: Ejemplos de reacciones del mecanismo RADM2

Inorgánicas	Orgánicas
$O^3P + O_2 \rightarrow O_3$	$EIH + HO \rightarrow EIHP + H_2O$
$NO_2 + h\nu \rightarrow O^3P + NO$	$HC3 + HO \rightarrow HC3P + HO_2 + HCHO + ALD + KEI$
$O_3 + NO \rightarrow NO_2 + O_2$	$OP1 + HO \rightarrow MO_2 + HO + HCHO$
$O_3 + h\nu \rightarrow O^1D + O_2$	$XYL + HO \rightarrow XYLP + CSL + HO_2$
$NO_3 + NO \rightarrow 2NO_2$	$ISO + NO_3 \rightarrow OLN$
$O^1D + HO_2 \rightarrow 2HO$	$ALD + NO_3 \rightarrow ACO_3 + HNO_3$
$CO + HO \rightarrow HO_2 + CO_2$	$XNO_2 + MO_2 \rightarrow HCHO + HO_2$

de la atmósfera. Se emplean cuatro grupos para representarlos: OL2 (eteno $CH_2=CH_2$), OLT (alquenos terminales $R-CH=CH_2$), OLI (*trans*-2-buteno, cicloalcanos, dienos primarios y alquenos internos) e ISO (isopreno).

Los ácidos orgánicos pueden generarse a partir de alquenos a través de las reacciones de intermediarios Criegee. Por ejemplo, el ácido fórmico se puede producir a partir de eteno mediante la reacción con O_3 encontrado por Su et al. (1980). Se asume que todos los intermediarios Criegee reaccionan con el agua para producir ácidos orgánicos.

La química de los aromáticos es muy importante en atmósferas urbanas contaminadas. Por ejemplo Leone y Seinfeld (1985) encontraron que casi un tercio de las conversiones de NO a NO_2 son debidas a la fotooxidación de especies aromáticas. La química de los aromáticos se incluye en el modelo RADM2 mediante parametrizaciones. Se incluyen dos grupos aromáticos: TOL y el XYL. El TOL representa benceno, tolueno y otros aromáticos poco reactivos. Su rapidez de reacción con el HO es igual a la del HO-tolueno. La reactividad pesada se usa para pesar emisiones de benceno y halobencenos en la clase TOL. El XYL representa xilenos, otros di y poli alquilbencenos y otros aromáticos con rapidez de reacción mayor a la del xileno. Entre los productos de la descomposición de los aromáticos se encuentran el glioxal (GLY), metilglioxal (MGLY) y los carbonilos insaturados (DBC).

El RADM2 emplea un esquema de reacciones secundarias donde se incluye la formación del cresol y otros productos de la fragmentación de anillos aromáticos. La reacción del HO con tolueno y xilenos producen un alquil fenol (CSL), radicales HO_2 y radicales peroxi aromáticos. El alquilfenol reacciona con el HO para producir nitratos orgánicos, convirtiendo el HO en HO_2 y abre el anillo aromático para producir un radical (TCO_3). El radical TCO_3 puede reaccionar con el NO o NO_2 para producir PAN. La especie DCB representa una mezcla de fragmentos desconocidos de aromáticos y dicarbonilos. No se incluye la química del benzaldehído ya que se produce en pequeñas cantidades y es un sumidero mas que una fuente de radicales.

4.4. Reacciones entre Radicales Peroxi

Las reacciones entre radicales peroxi juegan un papel importante en la química atmosférica. Bajo condiciones rurales y limpias, esas reacciones pueden afectar fuertemente las concentraciones de peróxido de hidrógeno, alcohol y de ácidos orgánicos y la predicción de especies con nitrógeno. Esto también ocurre bajo las condiciones de la ciudad de México (Ruiz, 1989). En el RADM2 se incluyen una gran cantidad de reacciones entre radicales peroxi. Éstas representan un importante sumidero para HO_2 y radicales peroxi orgánicos para bajas concentraciones de NO_x bajo las cuales ocurre la formación de peróxido de hidrógeno.

5. EVALUACIÓN DEL MODELO METEOROLÓGICO

5.1. Antecedentes

Los procesos de transporte y fotoquímica de los contaminantes presentes en la atmósfera dependen en gran medida de las condiciones meteorológicas. Si no se pueden reproducir las variables meteorológicas como temperatura, intensidad y dirección del viento, humedad y presión, el modelo fotoquímico no podrá reflejar satisfactoriamente la calidad del aire. Por lo anterior es importante evaluar los resultados del módulo meteorológico del modelo.

En este capítulo se describe el área de estudio, la estrategia de anidamiento del modelo, la metodología empleada para la selección de los días de simulación, las actividades de evaluación del modelo meteorológico y un estudio de sensibilidad de las concentraciones de ozono con respecto a la intensidad del viento.

5.2. Descripción de la Región de Estudio

La ZMVM abarca aproximadamente 1,600 km². Se encuentra rodeada por cadenas montañosas, (Figura 5.1¹), que llegan a alcanzar hasta 5 km de altura sobre el nivel del mar. Al Sur se encuentra la Sierra del Ajusco, al Oeste la Sierra de las Cruces y al Este la Sierra Nevada, que incluye los volcanes Iztaccíhuatl y Popocatepetl. Al Norte se encuentra la Sierra de Guadalupe. Esta compleja orografía da a la región características climatológicas particulares, como el estancamiento de masas de aire, sobre todo cuando provienen del norte, e inversiones térmicas frecuentes, principalmente durante el invierno.

En esta región se encuentran 18 millones de habitantes (INEGI, 2000), más de 35,000 industrias, y circulan alrededor de 3 millones de automóviles. Los índices de contaminación son altos, sobrepasándose la norma de ozono de 11 ppm más del 70% de los días del año (Dirección General de Prevención y Control de la Contaminación, 1999).

¹ Imagen elaborada por la NASA-Goddard Space Flight Center (1999).

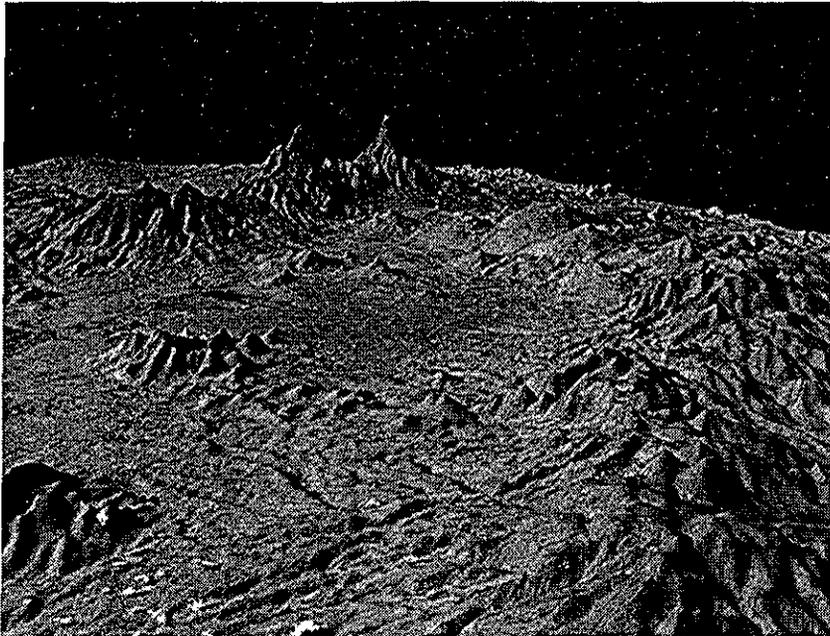


Fig. 5.1: Área de Estudio

5.3. Datos Utilizados

5.3.1. Datos Meteorológicos

Los datos suministrados al modelo MM5 son de reanálisis provenientes del *National Center for Environmental Prediction* (NCEP) y del *National Center for Atmospheric Research* (NCAR) (Kalnay et al , 1996) que se encuentran disponibles en servidores de la *National Oceanic and Atmospheric Administration* (NOAA)², con resolución temporal de 6 horas y espacial de $2.5^{\circ} \times 2.5^{\circ}$. Con estos datos se establecen las variables meteorológicas a escala sinóptica y se generan las condiciones iniciales y de frontera.

Para los casos estudiados se emplearon las siguientes variables: altura geopotencial (hgt), las componentes zonal (u) y meridional (v) del viento, presión reducida al nivel del mar (slp), humedad relativa (hr), temperatura (t) y temperatura superficial del mar (sst). Los niveles de presión empleados fueron: 1000, 925, 850, 700, 600, 500, 400, 300, 250, 200, 150, 100, 70, 50, 30, 20 y 10 mb.

Para la comparación en la vertical se emplearon los datos de sondeos colectados y puestos en la red por la universidad de Wyoming³ La estación

² Los datos de temperatura superficial de mar se obtuvieron de: <ftp://ftp.ncep.noaa.gov/pub/cmb/sst/oiupdate> y los datos de temperatura, direcciones de viento, humedad relativa del sitio <ftp://archive.cdc.noaa.gov>

³ <http://weather.uwyo.edu/upperair/sounding.html>

con la cual se compara los datos del modelo es la 76679 en México D.F. la cual corresponde a Tacubaya.

5.3.2. Datos de la RAMA

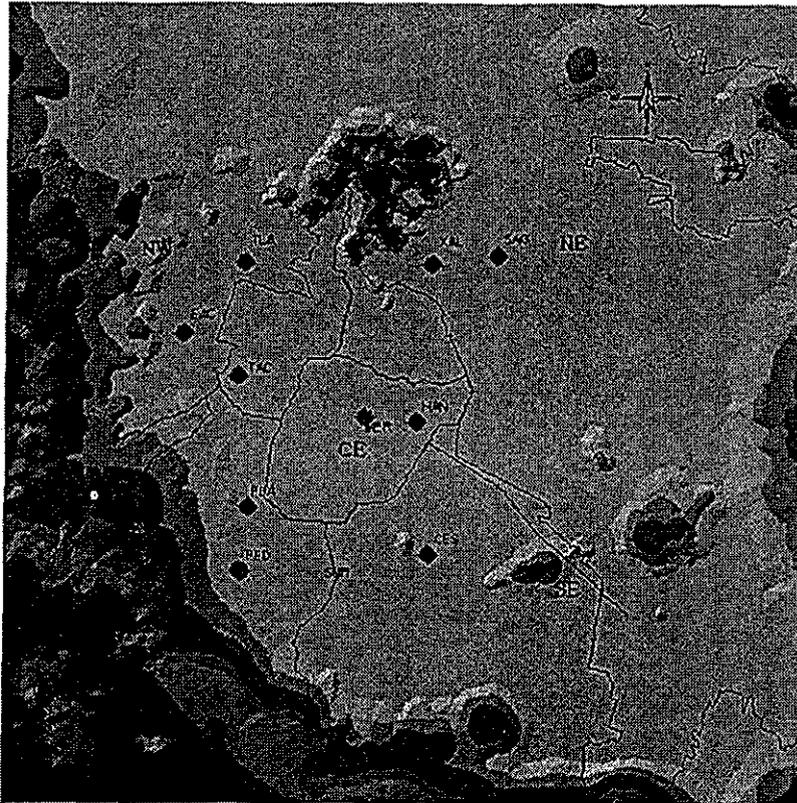


Fig. 5.2: Topografía y estaciones meteorológicas de la RAMA.

Las comparaciones entre los resultados de la modelación y los datos medidos, se efectuaron mediante el empleo de observaciones de la Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA), la cual posee 32 estaciones de las cuales en 10 se miden las variables meteorológicas, en 19 las concentraciones de ozono y en 26 el CO. En la Figura 5.2 se muestra la localización de las estaciones de la RAMA empleadas para realizar las comparaciones con los resultados del modelo. Se presentan 8 estaciones, ya que Tacuba y Pedregal en más de un episodio no tienen la información suficiente. Las variables meteorológicas empleadas para las comparaciones fueron temperatura, y magnitud y dirección del viento.

Las estaciones que se presentan son: al noroeste: Ilalnepantla (F) y Acatlán (G), noreste: Xalostoc (L) y San Agustín (N), al centro: Merced(X) y Hangares(Y), y al sur: Plateros (U) y Cerro de la Estrella (Q)

5.4. Estrategia de Anidamiento

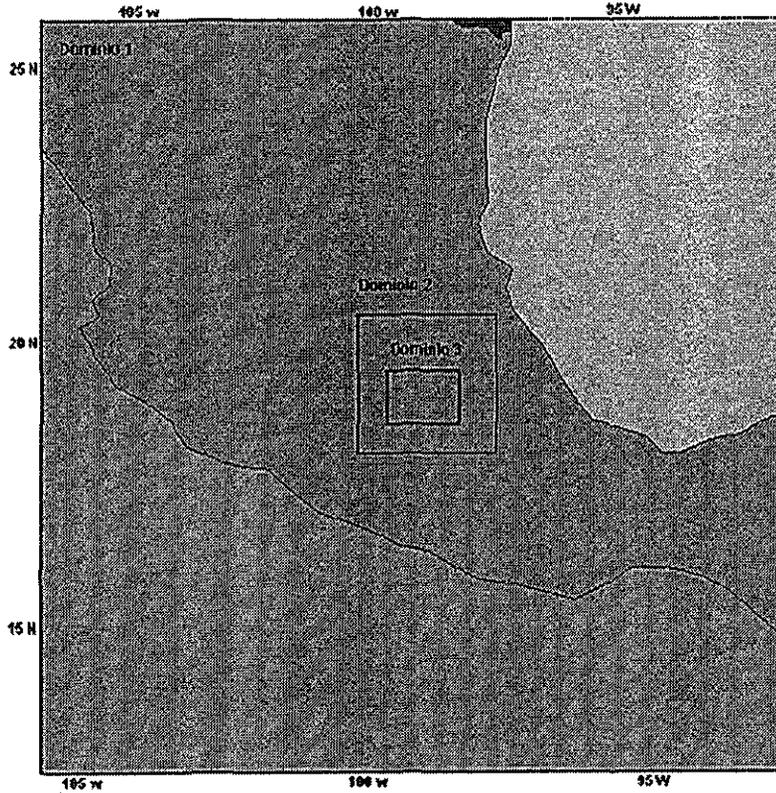


Fig. 5.3: Dominios empleados para la modelación

Se utilizó la estrategia de dominios anidados unidireccionales (*one way*), como se ve en la Figura 5.3. El primer dominio abarca gran parte de la república, incluyendo partes del Golfo de México y Pacífico. Se modeló la meteorología para 96 horas, en una malla de 60×60 celdas de 27 km de lado. El segundo abarca la parte central de la República, empleándose 34×34 celdas de 9 km y efectuándose la modelación para 72 horas. El tercero incluye el Valle de México, partes del Valle de Toluca, Morelos y Puebla, con un dominio de 40×52 celdas de 3 km, modelando también 72 horas. La Tabla 5.1 muestra las características de cada dominio

Tab. 5.1: Estrategia de anidamiento

Dominio número	Resolución Celda Km	Num celdas		Tiempo de modelación (hr)
		X	Y	
1	27	60	60	96
2	9	34	34	72
3	3	52	40	72

5.4.1. Selección de Días con Altos Índices de Contaminación

La utilidad principal del modelo de calidad del aire es su capacidad para reproducir escenarios donde se presenten altos niveles de concentración de contaminantes. Por lo anterior, la selección de los días de simulación se basó en los lineamientos propuestos por la Agencia de Protección al Ambiente de los Estados Unidos (USEPA) (EPA, 1991). Así mismo, los períodos evaluados corresponden a fechas donde también se han realizado modelaciones de calidad del aire, como en las del estudio investigación de material particulada y deterioro ambiental (IMADA).

Los períodos seleccionados son: caso 1, comprende del 29 de octubre al 1 de noviembre de 1996; caso 2, del 24 al 27 de febrero de 1997 y caso 3, del 2 al 5 de marzo de 1997. En el caso de la química las primeras 24 horas se utilizaron como inicialización, y para la evaluación comparativa se tomaron las últimas 48 horas.

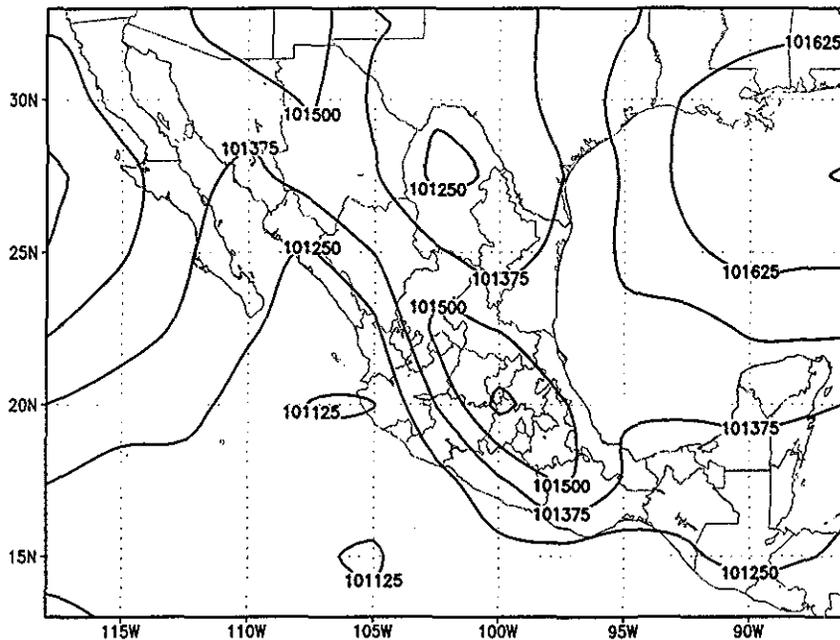


Fig. 5.4: Presión reducida al nivel del mar (Pa) durante el período del 29 de octubre al 1 de noviembre de 1996. Los datos provienen de reanálisis

Para seleccionar los días de simulación se utilizaron datos obtenidos de la RAMA, (ACIJ et al., 2000; DDF y SMA, 2000), y se ordenaron los episodios seleccionados de acuerdo a la magnitud del nivel de ozono (O_3), escogiéndose aquellos con valor más alto y cuya meteorología reflejara un caso típico. Durante los episodios escogidos un sistema de alta presión afectó la región de estudio, como se muestran en las Figuras 5.4, 5.5 y 5.6 donde se presenta el promedio de la presión reducida para los períodos de estudio

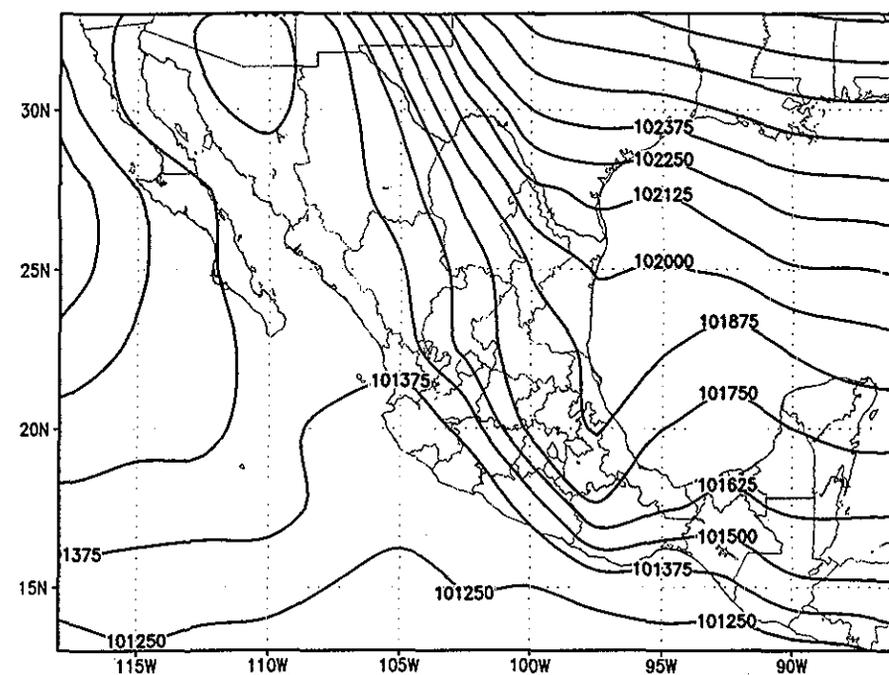


Fig. 5.5: Igual a la figura anterior. Período del 24 al 27 de febrero de 1997.

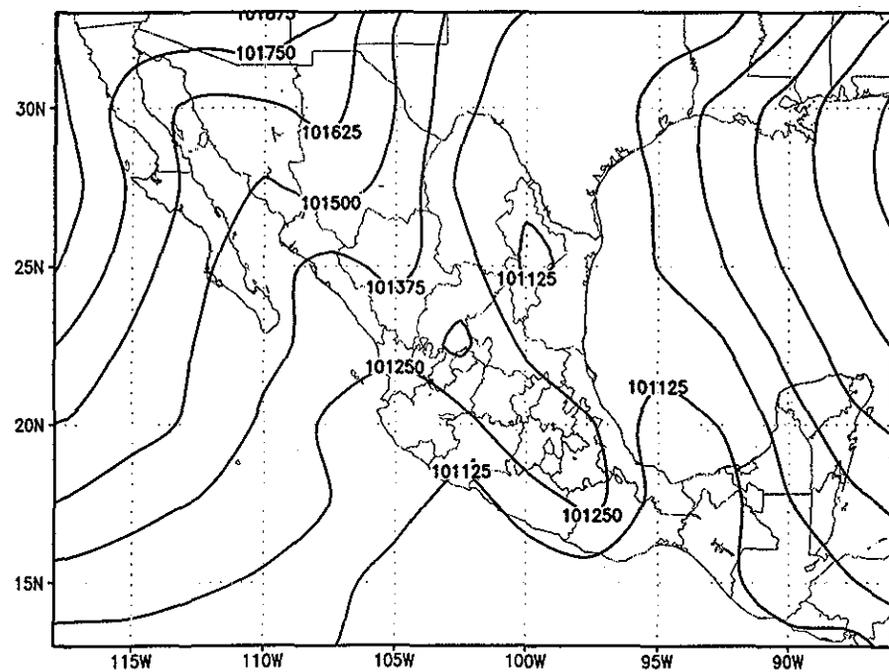


Fig. 5.6: Igual a la figura anterior. Período del 1 al 4 de marzo de 1997.

En esas fechas se alcanzaron altos índices de contaminación. En el primer caso, se presenta un sistema de alta presión que permaneció constante durante el período de tres días (barotrópico). En el segundo, el sistema de alta presión se encuentra durante el primer día y comienza a ser despalzado por un sistema de baja presión (baroclínico). En el tercero, se caracteriza por la entrada de un sistema de alta presión ya que se va incrementando la presión durante en el período de evaluación.

5.5. Evaluación del Modelo

Con la finalidad de conocer si un modelo puede reproducir el fenómeno que se desea simular es necesario evaluarlo. Para ello se emplean dos tipos de metodologías: una es la cualitativa y la otra es la cuantitativa.

La evaluación cualitativa se realiza mediante el empleo de gráficas, mapas de contornos y diagramas. En los cuales se muestran qué tan aproximados son los resultados del modelo contra los valores observados

La evaluación cuantitativa se realiza mediante el empleo de parámetros estadísticos.

5.5.1. Evaluación Cualitativa

A continuación, se presentan los mapas con el campo de vientos en la región generados por el modelo, las gráficas de series de tiempo, tanto para temperaturas como para intensidad de viento en superficie, las gráficas de frecuencias de dirección de vientos y los perfiles de temperatura y magnitud de viento para cada uno de los casos

De las Figuras 5.7(a), 5.8(a) y 5.9(a) se observa que el modelo es capaz de reproducir la brisa de valle durante las 15:00 LT. En las Figuras 5.7(b), 5.8(b) y 5.9(b) se observa que también describe la brisa de montaña. En estas figuras se aprecia también el cambio en la temperatura superficial.

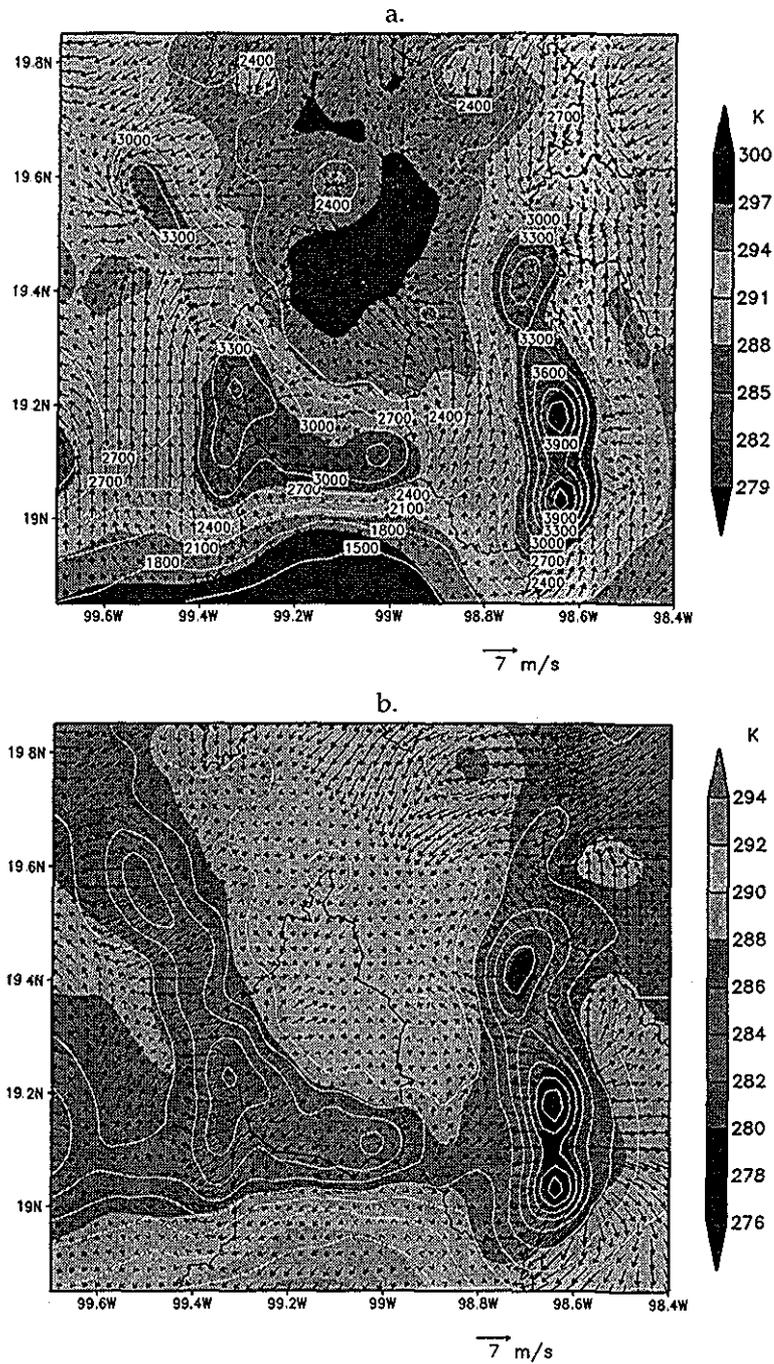


Fig. 5.7: Caso 1: Campo de viento y temperatura en superficie. a) 15:00 horas del 29 octubre b) 21:00 horas locales del 28 oct. Isolineas de nivel blancas en msn.

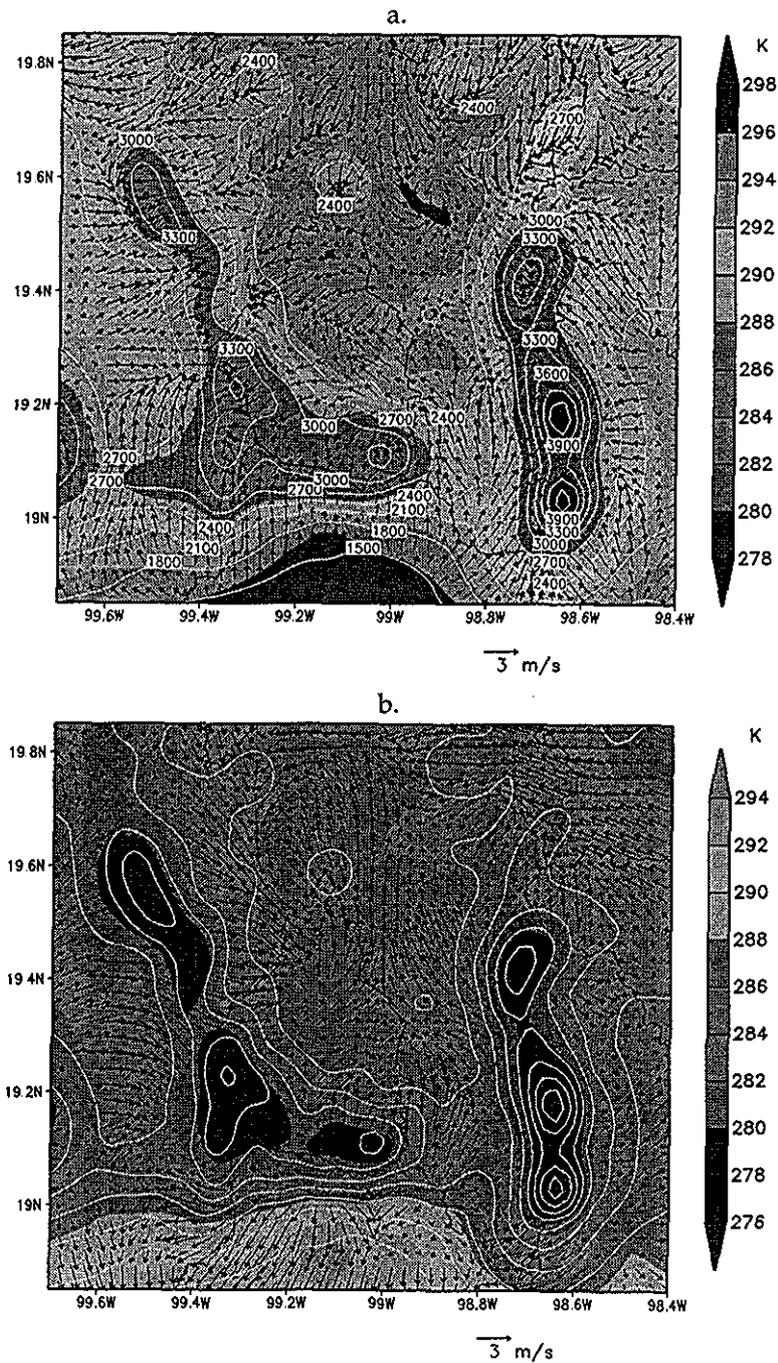


Fig. 5.8: Caso 2: Igual a la Figura 5.7 a) 15:00 hrs del 24 febrero. b) 21:00 hrs locales del 23 feb.

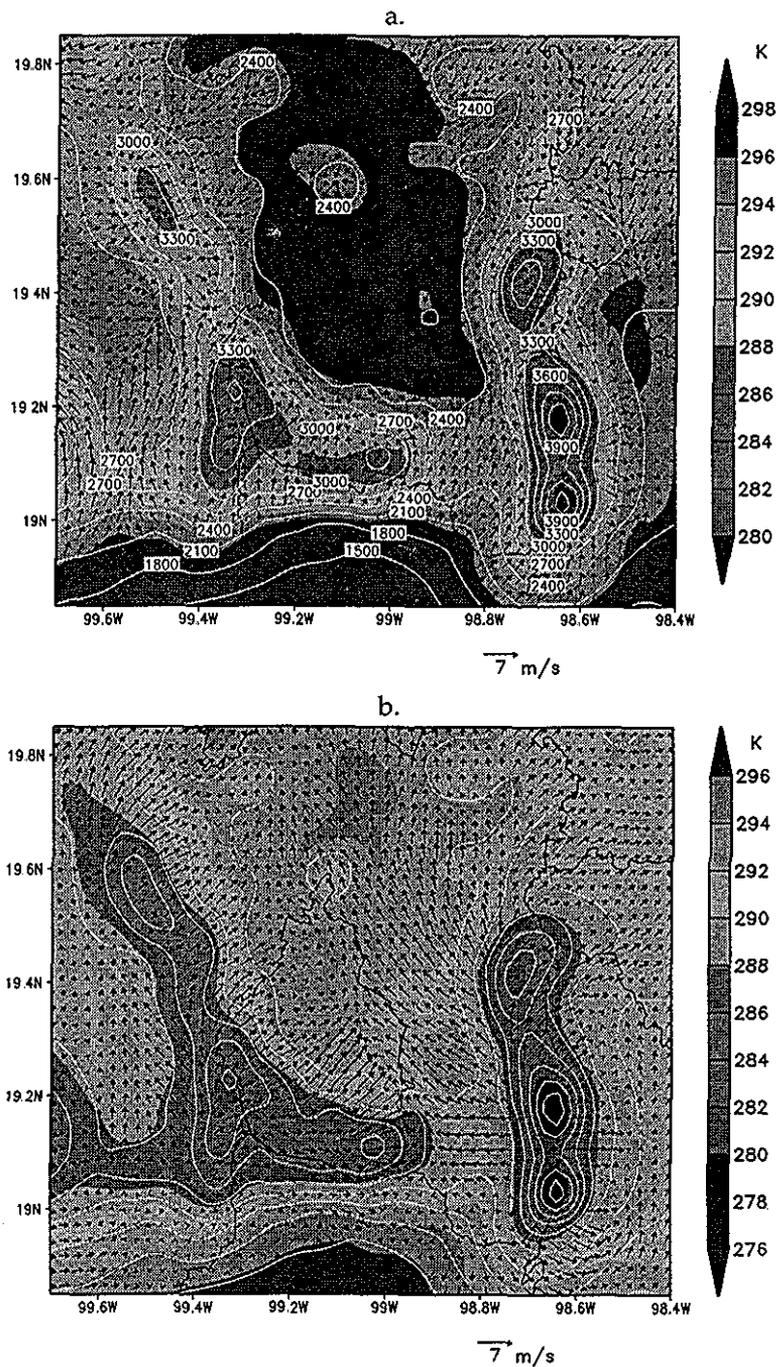


Fig. 5.9: Caso 3: Igual a la Figura 5.7 a) 15:00 horas del 3 marzo. b) 21:00 horas locales del 2 marzo

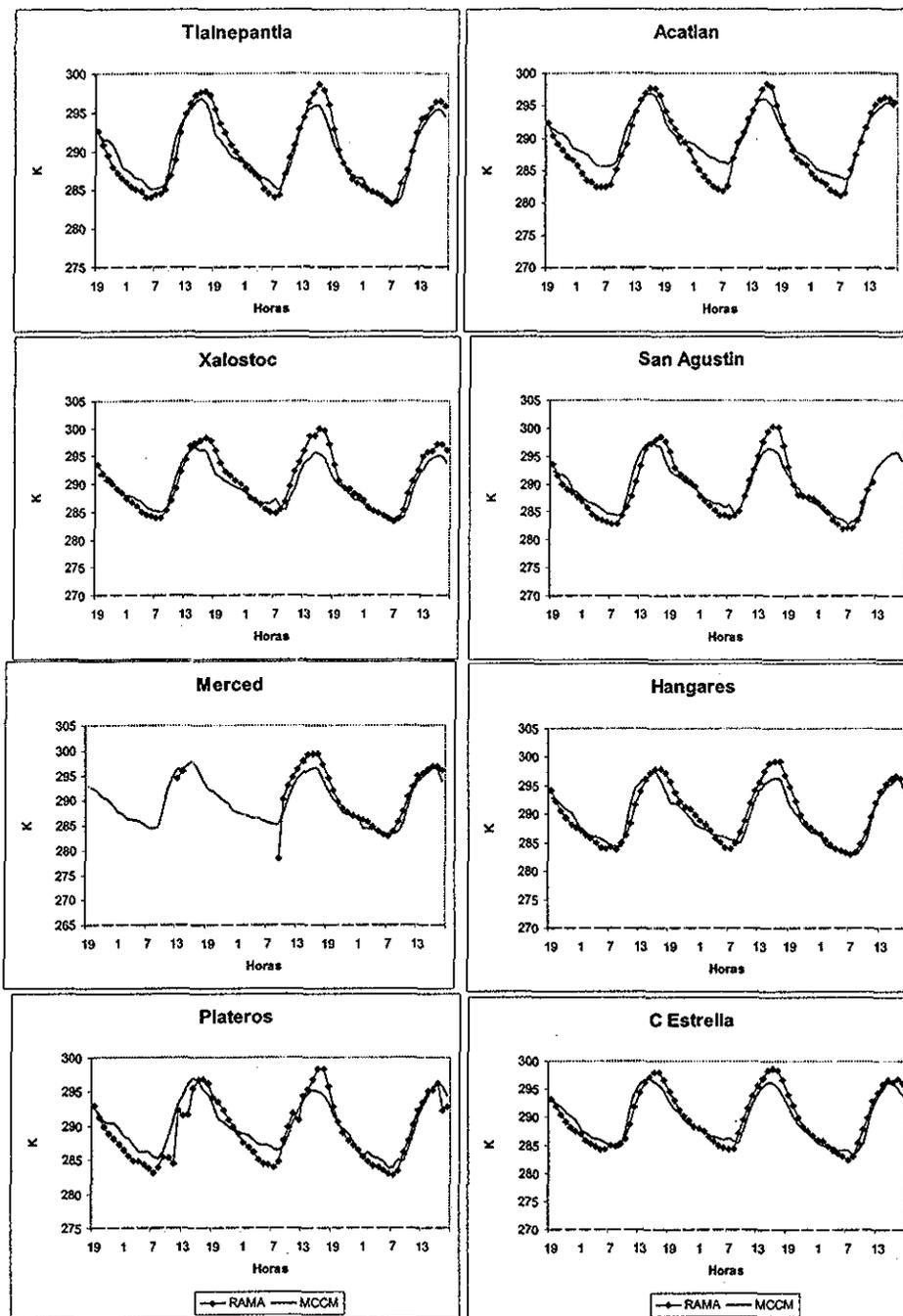


Fig. 5.10: Variación horaria de temperatura superficial [K] entre datos de la RAMA (●) y los datos generados por el MCCM (—), para el período del 29 de octubre al 1 de noviembre de 1996. Las discontinuidades indican ausencia de datos. Tiempo en horas locales

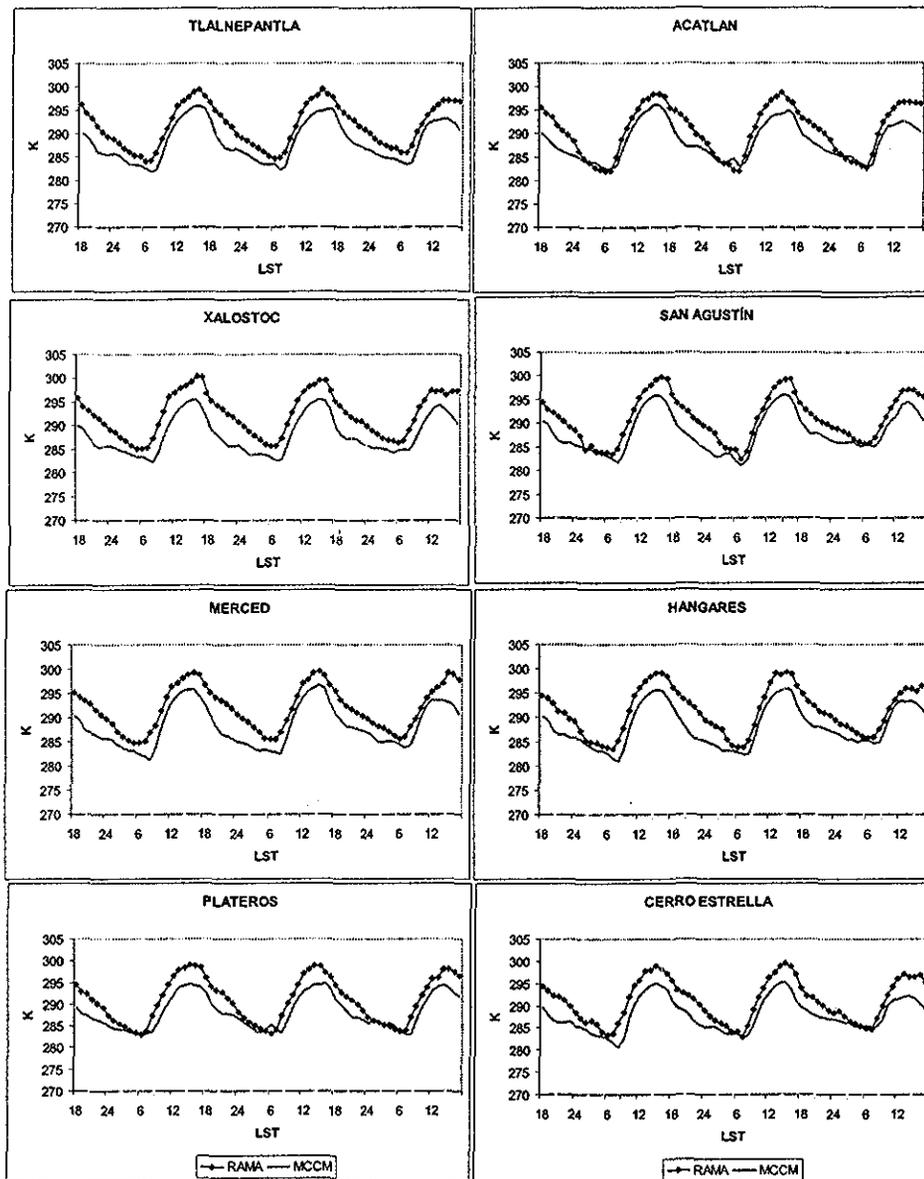


Fig. 5.11: Igual a la Figura 5.10 para el período del 24 al 27 de febrero 1997.

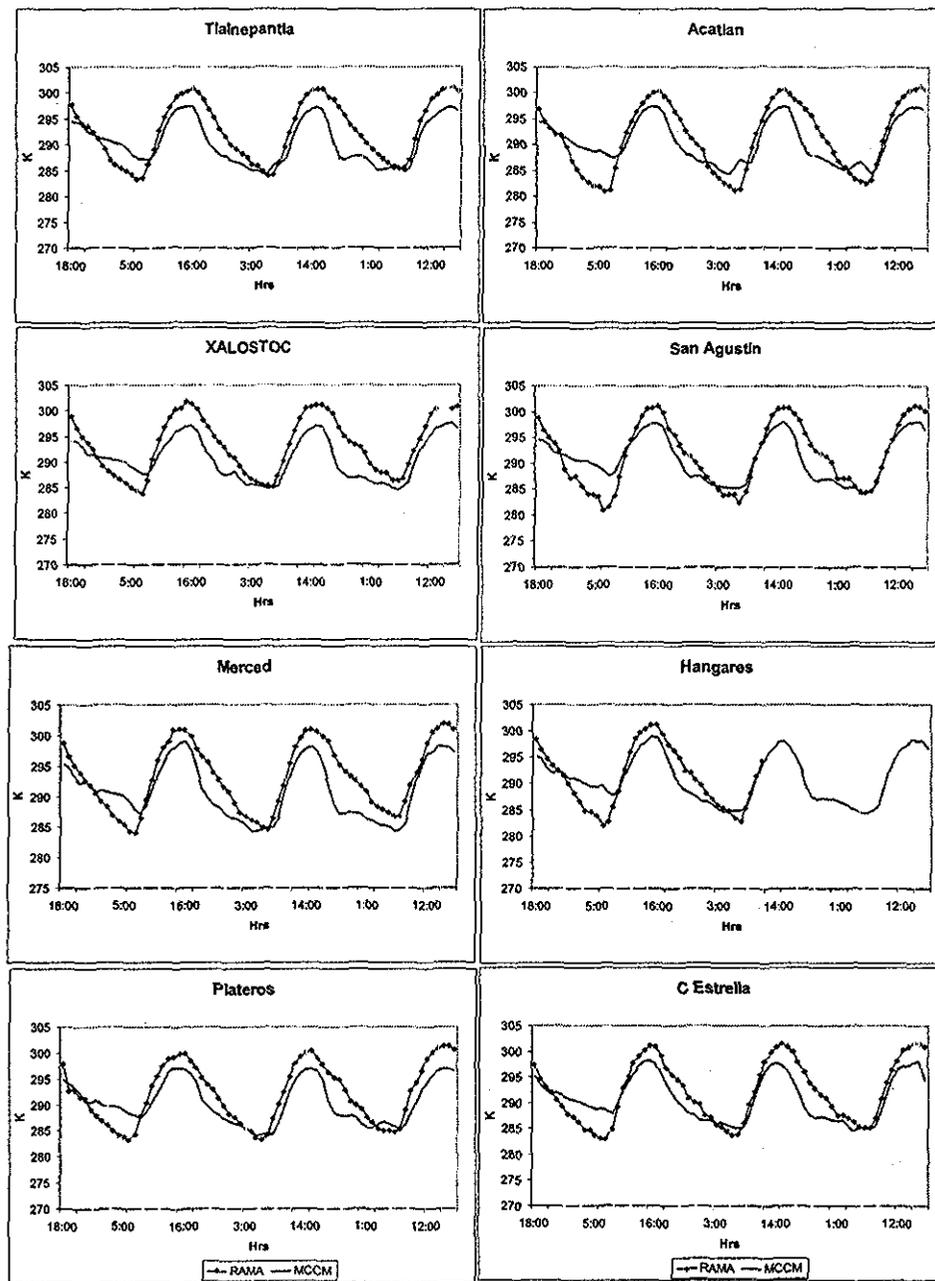


Fig. 5.12: Igual a la Figura 5.10 para el período del 1 al 4 de marzo 1997

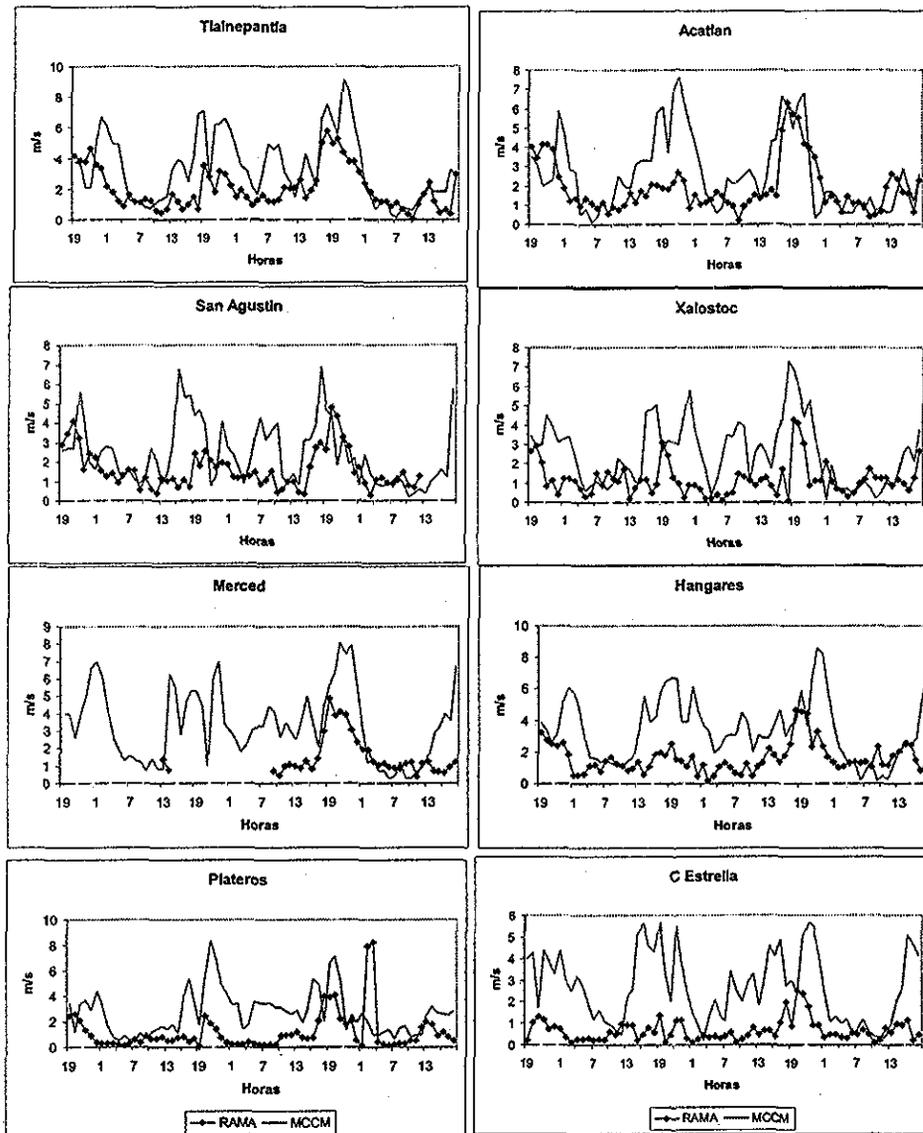


Fig. 5.13: Variación horaria de magnitudes de viento [m/s] en superficie entre datos medidos por la RAMA (•) y los resultados del MCCM (—), para el período del 29 de octubre al 1 de noviembre de 1996. Las discontinuidades indican ausencia de datos. Tiempo en horas locales.

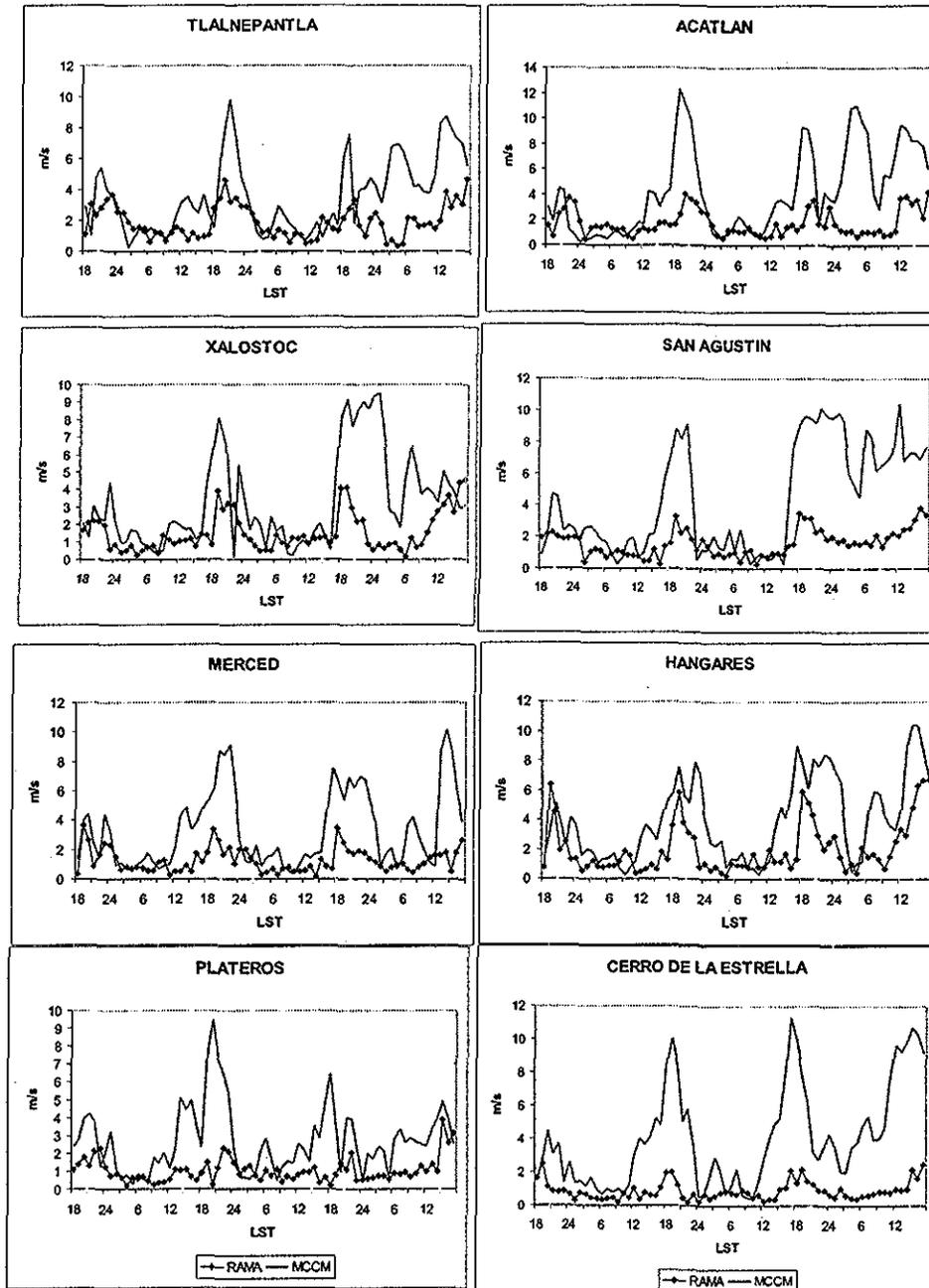


Fig. 5.14: Igual a la Figura 5.13 para el período del 24 al 27 de febrero 1997

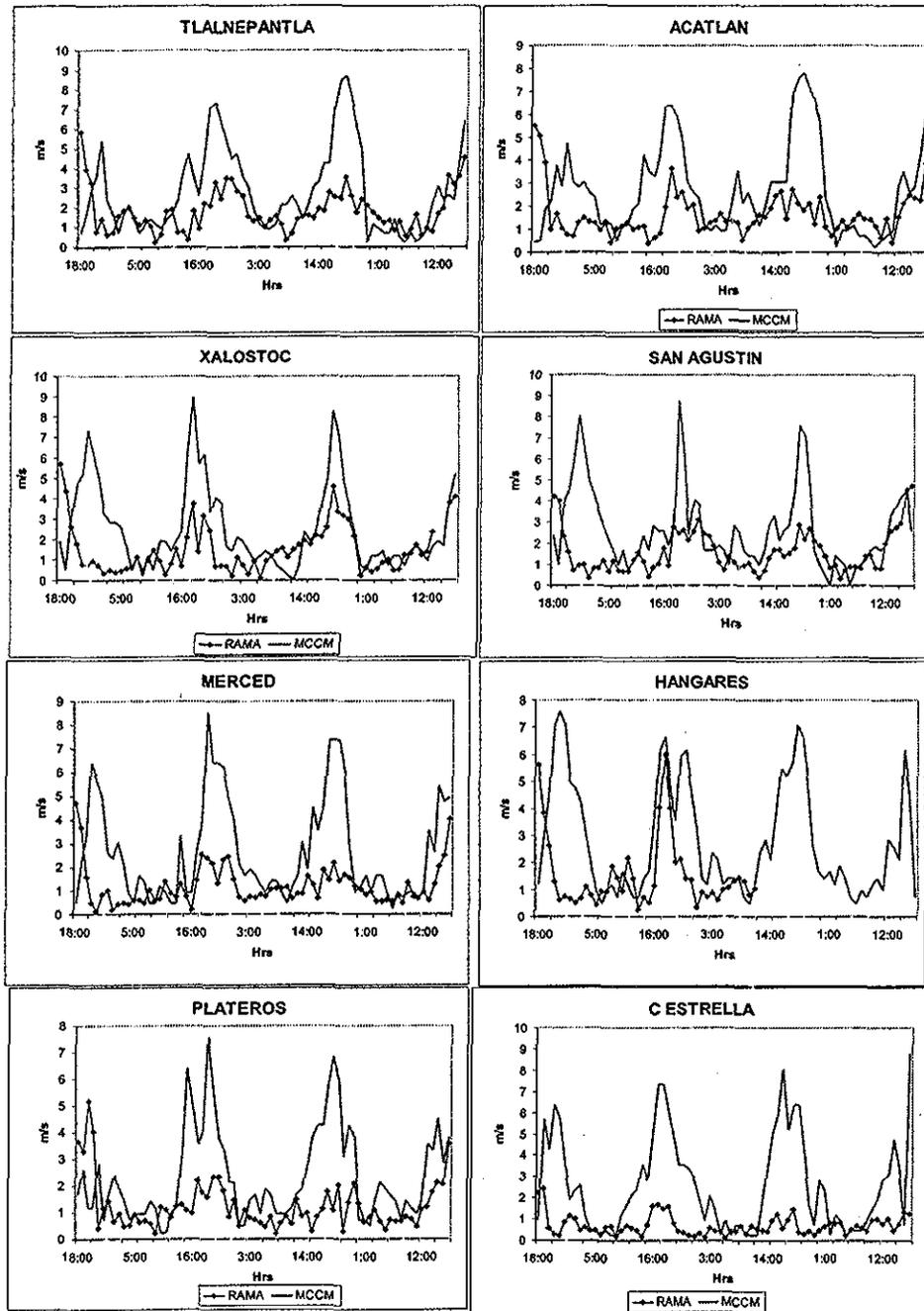


Fig. 5.15: Igual a la Figura 5.13 para el período del 1 al 4 de marzo 1997.

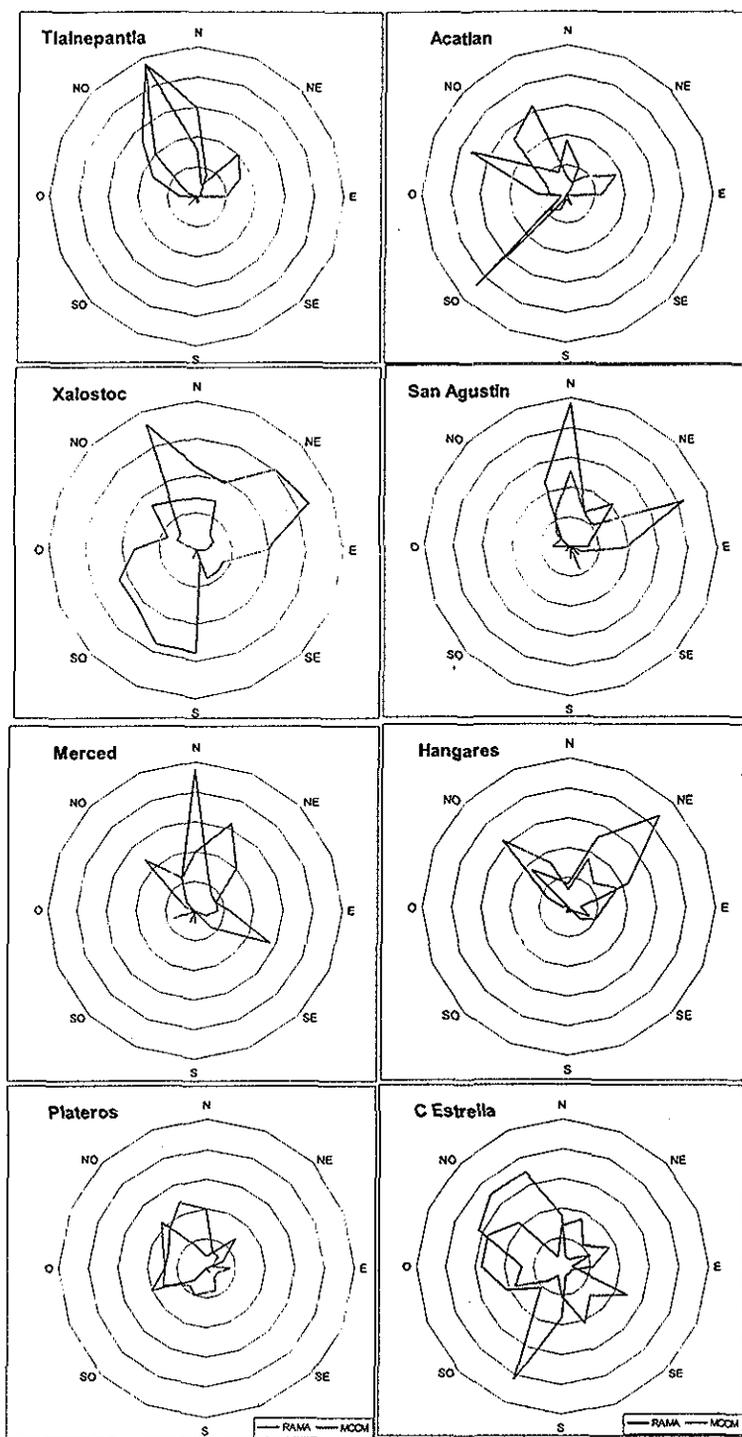


Fig. 5.16: Rosas de viento de frecuencia de dirección, para el período del 29 de octubre al 1 de noviembre de 1996.

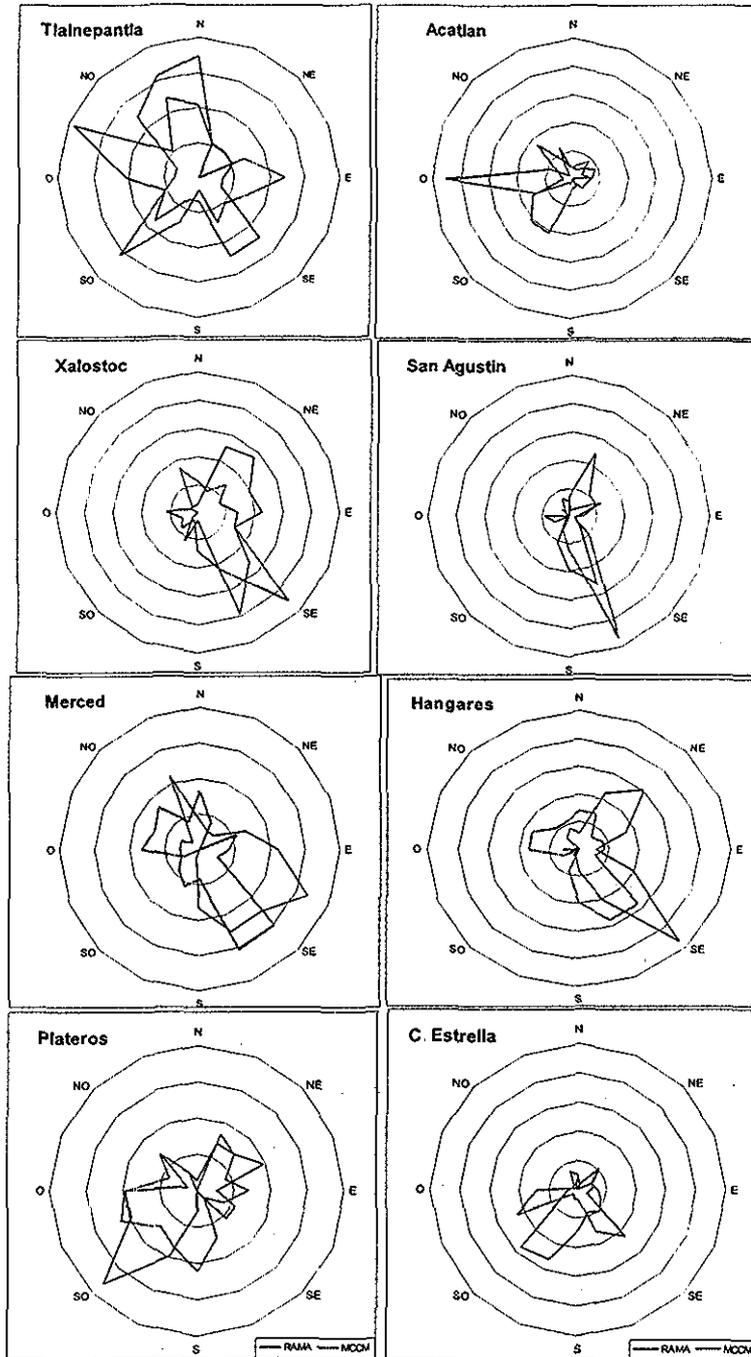


Fig. 5.17: Igual a la fig 5 16 para el período del 24 al 27 de febrero 1997.

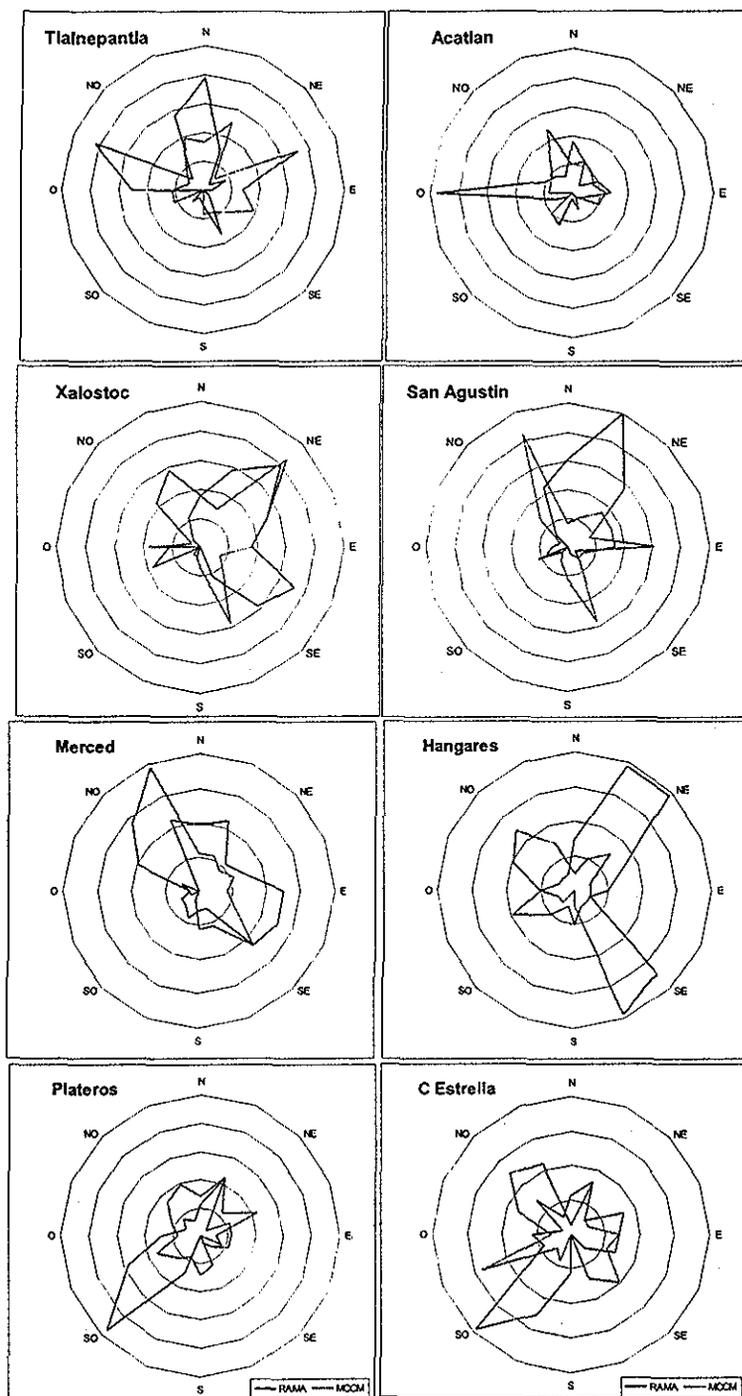


Fig. 5.18: Igual a la fig 5.16 para el período del 1 al 4 de marzo 1997.

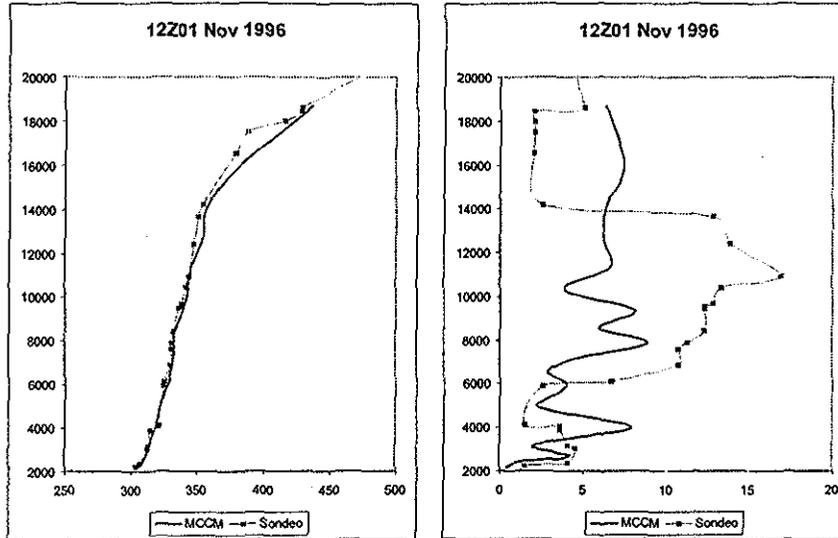


Fig. 5.19: Sondeo efectuado a las 12Z del 1 de noviembre de 1996 Perfil vertical de temperatura [K] (izq.) y magnitud de viento [m/s] (der). La ordenada es la altura en metros sobre el nivel del mar.

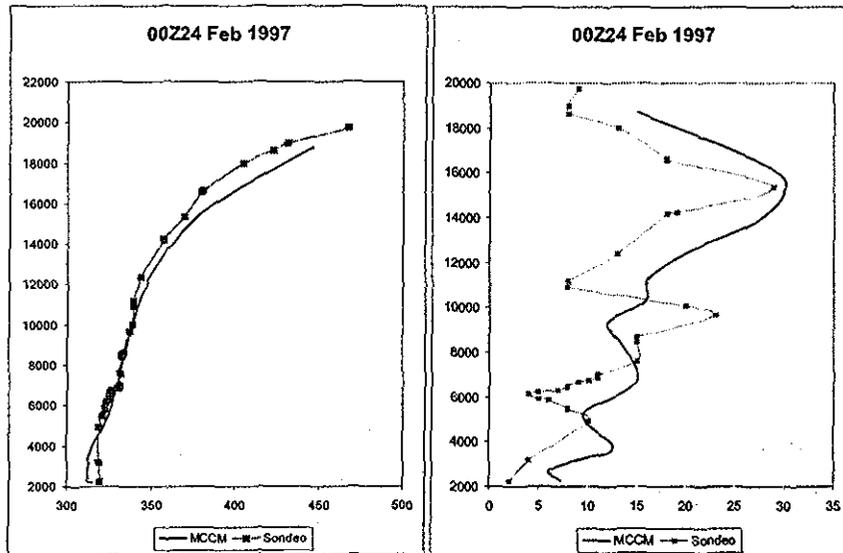


Fig. 5.20: Igua a la Figura 5.19 para el sondeo efectuado a las 00Z del 24 de febrero 1997.

En las Figuras 5.10, 5.11 y 5.12 se muestra que el modelo describe la variación diurna de temperatura y es muy similar a las mediciones de la RAMA.

En cuanto a magnitudes de viento en las Figuras 5.13, 5.14 y 5.15 donde se presentan las gráficas de series de tiempo, se ve que las intensidades

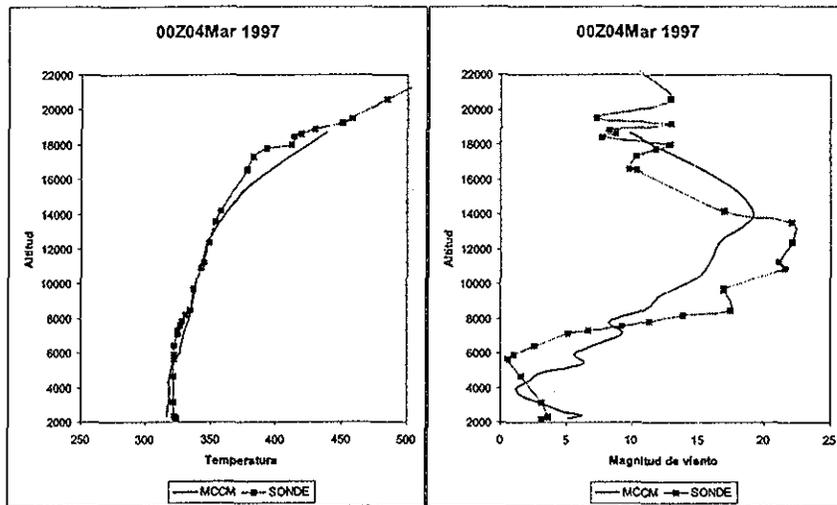


Fig. 5.21: Igua a la Figura 5.19 para el sondeo de las 00Z del 3 de marzo 1997.

de viento generadas por el modelo muestran un patrón horario similar al obtenido por las mediciones y también para algunas horas los resultados del modelo poseen valores mayores que los datos medidos.

En cuanto a la dirección en los diagramas de radiales de frecuencias de dirección de vientos, en las Figuras 5.16, 5.17 y 5.18 se distingue que en la mayoría de las estaciones, la dirección dominante generada por los resultados del modelo es parecida a la medida por la RAMA.

Las Figuras 5.19, 5.20 y 5.21 se presenta una comparación de los resultados del modelo con sondeos verticales apreciándose que el perfil de temperatura del modelo es similar al del sondeo. En cuanto a las velocidades horizontales en la vertical los perfiles del modelo poseen una forma similar a los medidos.

5.5.2. Estudio Estadístico

Se realizó un estudio estadístico de error (Willmott, 1981; Willmott et al., 1985) donde se emplearon los siguientes parámetros⁴:

σ_o desviación normal de los valores observados

σ_p desviación normal de los valores del modelo

RDCM Raíz cuadrática media de la desviación, entre valores medidos y modelados.

RDCMs raíz sistemática cuadrática media de la desviación, entre valores medidos y modelados

RDCMu raíz no sistemática cuadrática media de la desviación, entre valores medidos y modelados

⁴ Para una descripción detallada de los mismos ver Apéndice A: Parámetros estadísticos, pág 90

Ic índice de concordancia entre los valores medidos y los del modelo.

I_s índice de semejanza entre dos vectores

x_0 Promedio de las diferencias de ángulos

\bar{R} longitud de resultante de un conjunto de vectores.

S_0 varianza circular

El nivel de simulación del modelo se considera alto si Ic, \bar{R} y I_s tienden a 1, si σ_p es similar a σ_o , RDCM es menor o igual a σ_o , y si x_0 y S_0 tienden a cero. En las tablas 5.2, 5.3 y 5.4 se presentan los resultados del estudio estadístico de temperaturas para cada caso:

Tab. 5.2: Análisis estadístico de temperaturas, caso 1

Estación	Ic	CC	σ_o	σ_p	RDCM	RDCM _s	RDCM _u	$\frac{RDCM_s}{RDCM}$	$\frac{RDCM_u}{RDCM}$
Tacuba	0.96	0.97	4.63	4.01	1.85	1.57	0.98	0.85	0.53
Tlalnepantla	0.97	0.97	4.72	3.93	1.39	0.94	1.02	0.67	0.74
Acatlán	0.95	0.97	5.23	3.77	2.06	1.81	0.98	0.88	0.48
Xalostoc	0.95	0.96	4.87	3.74	1.91	1.57	1.08	0.82	0.57
San Agustín	0.96	0.95	5.08	4.06	1.71	1.20	1.21	0.70	0.71
C Estrella	0.97	0.96	4.82	4.14	1.42	0.88	1.12	0.62	0.79
Pedregal	0.95	0.96	4.56	3.30	1.68	1.41	0.90	0.84	0.54
Plateros	0.95	0.92	4.48	3.67	1.89	1.24	1.42	0.66	0.75
Merced*	0.96	0.95	5.55	4.83	2.02	1.39	1.46	0.69	0.72
Hangares	0.97	0.96	4.92	4.28	1.57	0.97	1.23	0.62	0.78
Promedio	0.96	0.96							

Tab. 5.3: Análisis estadístico para Temperaturas, caso 2

Estación	Ic	CC	σ_o	σ_p	RDCM	RDCM _s	RDCM _u	$\frac{RDCM_s}{RDCM}$	$\frac{RDCM_u}{RDCM}$
Tlalnepantla	0.86	0.96	4.56	4.18	3.45	1.01	3.59	0.29	3.55
Acatlán	0.89	0.97	5.28	3.92	2.89	1.25	3.15	0.43	2.51
Xalostoc	0.79	0.96	4.50	3.98	4.35	1.18	4.51	0.27	3.83
San Agustín	0.89	0.95	4.81	4.20	3.02	1.15	3.23	0.38	2.81
C Estrella	0.84	0.96	4.74	3.73	3.45	1.19	3.65	0.34	3.08
Pedregal*	0.82	0.95	6.17	3.49	4.23	1.06	4.36	0.25	4.12
Plateros	0.88	0.95	5.11	3.87	3.05	1.07	3.23	0.35	3.01
Merced	0.83	0.95	4.52	4.36	3.74	1.39	3.99	0.37	2.87
Hangares	0.86	0.96	4.75	4.21	3.32	1.25	3.55	0.38	2.84
Promedio	0.85	0.96							

Tab. 5.4: Análisis estadístico para Temperaturas, caso 3

Estación	Ic	CC	σ_o	σ_p	RDCM	RDCM _s	RDCM _u	$\frac{RDCM_s}{RDCM}$	$\frac{RDCM_u}{RDCM}$
Tlalnepantla	0.87	0.86	5.71	4.23	3.68	2.99	2.14	0.81	0.58
Acatlán	0.88	0.86	6.54	4.21	3.74	3.06	2.16	0.82	0.58
Xalostoc	0.84	0.87	5.46	3.99	3.92	3.37	2.00	0.86	0.51
San Agustín	0.90	0.87	6.14	4.44	3.29	2.45	2.20	0.74	0.67
C Estrella	0.90	0.88	5.91	4.30	3.25	2.54	2.04	0.78	0.63
Pedregal	0.90	0.91	5.32	3.81	2.84	2.34	1.62	0.82	0.57
Plateros	0.89	0.88	5.70	4.09	3.27	2.64	1.93	0.81	0.59
Merced	0.88	0.87	5.43	4.66	3.49	2.65	2.26	0.76	0.65
Hangares*	0.40	0.25	1.31	2.54	3.18	2.02	2.46	0.63	0.77
Promedio	0.88	0.87							

Tab. 5.5: Análisis estadístico de magnitudes de viento, caso 1

Estación	Ic	CC	σ_o	σ_p	RDCM	RDCM _s	RDCM _u	$\frac{RDCM_s}{RDCM}$	$\frac{RDCM_u}{RDCM}$
Tacuba	0.60	0.47	1.31	1.82	2.04	1.25	1.61	0.61	0.79
Tlalnepantla	0.65	0.61	1.34	2.17	2.19	1.35	1.72	0.62	0.79
Acatlán	0.65	0.52	1.32	1.95	1.86	0.82	1.66	0.44	0.90
Xalostoc	0.43	0.28	0.85	1.66	2.15	1.45	1.60	0.67	0.74
San Agustín	0.50	0.31	0.98	1.58	1.80	1.00	1.50	0.56	0.83
C. Estrella	0.27	0.39	0.49	1.60	2.51	2.03	1.47	0.81	0.59
Pedregal	0.28	0.25	0.53	2.02	2.50	1.55	1.96	0.62	0.78
Plateros	0.38	0.18	1.48	1.71	2.58	1.95	1.69	0.76	0.65
Merced*	0.58	0.62	1.12	2.32	2.50	1.71	1.83	0.68	0.73
Hangares	0.38	0.27	0.92	1.97	2.65	1.86	1.89	0.70	0.71
promedio	0.47	0.39							

Tab. 5.6: Análisis estadístico para magnitudes de viento, caso 2

Estación	Ic	CC	σ_o	σ_p	RDCM	RDCM _s	RDCM _u	$\frac{RDCM_s}{RDCM}$	$\frac{RDCM_u}{RDCM}$
Tlalnepantla	0.49	0.48	1.03	2.35	1.69	2.06	2.67	1.22	1.58
Acatlán	0.37	0.43	1.01	3.35	2.50	3.03	3.93	1.21	1.57
Xalostoc	0.43	0.38	1.08	2.62	1.81	2.42	3.03	1.34	1.67
San Agustín	0.35	0.71	0.82	3.33	3.18	2.36	3.96	0.74	1.25
C. Estrella	0.23	0.60	0.54	3.02	3.41	2.41	4.18	0.71	1.22
Pedregal*	0.34	0.37	0.45	1.71	0.81	1.59	1.79	1.96	2.20
Plateros	0.31	0.27	0.66	1.86	1.71	1.79	2.47	1.05	1.45
Merced	0.36	0.48	0.80	2.60	2.15	2.28	3.13	1.06	1.46
Hangares	0.63	0.63	1.71	2.76	2.00	2.14	2.93	1.07	1.47
Promedio	0.39	0.48							

Tab. 5.7: Análisis estadístico para magnitudes de viento, caso 3

Estación	Ic	CC	σ_o	σ_p	RDCM	RDCM _s	RDCM _u	$\frac{RDCM_s}{RDCM}$	$\frac{RDCM_u}{RDCM}$
Tlalnepantla	0.45	0.43	1.07	2.53	2.75	1.53	2.28	0.56	0.83
Acatlán	0.34	0.24	0.97	2.30	2.78	1.65	2.24	0.59	0.81
Xalostoc	0.50	0.44	1.18	2.46	2.71	1.55	2.22	0.57	0.82
San Agustín	0.39	0.30	0.99	2.25	2.71	1.66	2.15	0.61	0.79
C. Estrella	0.21	0.39	0.46	2.63	3.49	2.51	2.42	0.72	0.69
Plateros	0.32	0.25	0.92	2.01	2.51	1.59	1.95	0.63	0.77
Pedregal	0.38	0.46	0.51	1.88	1.93	0.94	1.68	0.49	0.87
Merced	0.34	0.37	0.85	2.51	3.04	1.96	2.32	0.64	0.76
Hangares*	0.40	0.25	1.31	2.54	3.18	2.02	2.46	0.63	0.77
Promedio	0.37	0.35							

Tab. 5.8: Análisis estadístico de las direcciones de viento, caso 1

Estación	I _s	α_0	R	S ₀
Tacuba	0.76	28	0.58	0.42
Tlalnepantla	0.68	25	0.64	0.36
Acatlán	0.46	37	0.45	0.55
Xalostoc	0.65	113	0.18	0.82
San Agustín	0.46	37	0.38	0.62
C. Estrella	0.45	115	0.20	0.80
Pedregal	0.45	135	0.14	0.86
Plateros	0.63	16	0.26	0.74
Merced*	0.75	12	0.51	0.49
Hangares	0.74	8	0.49	0.51
Promedio	0.60	53		

Tab. 5.9: Análisis estadístico de las direcciones de viento, caso 2

Estación	I_s	x_0	R	S_0
Tlalnepantla	0.70	25	0.43	0.57
Acatlán	0.66	37	0.39	0.61
Xalostoc	0.70	3	0.41	0.59
San Agustín	0.76	9	0.54	0.46
C Estrella	0.54	77	0.31	0.69
Pedregal*	0.69	7	0.39	0.61
Plateros	0.52	15	0.04	0.96
Merced	0.62	18	0.26	0.74
Hangares	0.72	25	0.49	0.51
Promedio	0.66	24		

Tab. 5.10: Análisis estadístico de direcciones de viento, caso 3

Estación	I_s	x_0	R	S_0
Tlalnepantla	0.65	20	0.32	0.68
Acatlán	0.74	12	0.48	0.52
Xalostoc	0.60	54	0.34	0.66
San Agustín	0.70	9	0.41	0.59
C. Estrella	0.43	126	0.24	0.76
Pedregal	0.47	152	0.07	0.93
Plateros	0.55	38	0.11	0.89
Merced	0.67	20	0.36	0.64
Hangares*	0.52	80	0.27	0.73
Promedio	0.59	57		

De estos resultados se observa que el índice de concordancia (I_c) para temperaturas en los tres casos es mayor a 0.85 (tablas 5.2, 5.3 y 5.4). Esto indica que el modelo genera resultados muy parecidos a los observados. En cuanto a direcciones de viento en las tablas 5.8, 5.9 y 5.10, el índice de semejanza (I_s) posee valores mayores a 0.59 y el promedio de la diferencia de ángulos (x_0) es menor a 57° , lo anterior nos indica que el modelo puede describir los campos de vientos a diferentes horas en la ZMVM.

En cuanto a las magnitudes de viento en las tablas 5.5, 5.5 y 5.5, el índice de concordancia varía de entre 0.37 a 0.47, lo que indica un bajo nivel de simulación.

5.5.3. Discusión

Aunque el modelo es capaz de reproducir el ciclo diurno del campo de vientos y temperaturas, los resultados preliminares muestran una sobrepredicción en la intensidad de viento, como se muestra en las Figuras 5.13, 5.14 y 5.15. Se observa que los resultados del modelo (línea sólida) — durante el período que comprende de las 16:00 a 5:00 hrs — poseen valores entre 2 y 3 veces más altos con respecto a las mediciones de la RAMA (la línea con marcas).

Las variaciones entre los resultados del modelo y los datos observados en los diferentes escenarios se pueden deber a procesos de turbulencia, ya que la turbulencia en la capa cercana a la superficie depende de dos efectos

específicos: *a)* el calentamiento atmosférico, que provoca las corrientes de convección naturales y *b)* la turbulencia "mecánica", que es el resultado de los esfuerzos cortantes del viento. Para el caso del mes de octubre de 1996, el sistema de alta presión permanece en la región durante el período de evaluación, haciendo así que los vientos y temperaturas generadas por el modelo sea influenciadas principalmente por la turbulencia térmica. En el caso 2 (febrero 1997) el sistema de alta presión es desplazado por uno de baja presión lo que provoca que exista más turbulencia mecánica y por lo tanto ésta influya más en los resultados del modelo. Finalmente para el caso 3, se inicia con la entrada de un sistema de alta presión en la región, la entrada del sistema no es tan rápida como en el caso 2 y aunque genera turbulencia mecánica ésta no es tan marcada como en el caso 2. A partir del estudio estadístico, se observa que, los resultados del modelo al compararlos con observaciones poseen una concordancia mayor cuando el sistema de alta presión permanece constante durante el período de evaluación y se tiene menor concordancia cuando el sistema de alta presión se encuentra en movimiento.

Para disminuir la diferencia entre los resultados del modelo y los datos medidos se emplearon las diferentes parametrizaciones que incluye el modelo MM5, se modificaron los coeficientes de difusión turbulenta, rugosidad, albedo y el esquema de radiación sin conseguir cambios importantes en los resultados.

Modificando las condiciones iniciales y de frontera con la integración de información proveniente de estaciones de superficie y sondeos (con el programa *little_r*), y además aplicando la asimilación de datos durante la modelación (*nudg*) se pudo mejorar la concordancia entre los resultados del modelo y las observaciones. Si bien la asimilación de datos en cuatro dimensiones puede ayudar a disminuir la diferencia entre los resultados y los valores medidos, el transporte de los compuestos químicos, como se mencionó anteriormente, se encuentra acoplado a la parametrización de transporte turbulento de la capa límite de Burk-Thompson, y en el modelo en su estado actual no puede aplicarse la asimilación de datos.

Por otro lado, en la evaluación de las políticas para el control de la contaminación se consideran modificaciones en el tipo de uso de suelo (Por ejemplo, de agrícola a urbano y de forestal a agrícola) y la asimilación de datos impediría ver los efectos en la calidad del aire debidos a una variación en el tipo de uso de suelo. Para mejorar las velocidades de viento en la superficie resulta necesario incluir un módulo de capa superficial al modelo.

5.6. Sensibilidad al Campo de Vientos

De la discusión anterior, se concluyó que era necesario conocer qué tan importante son las desviaciones del campo de vientos en los resultados de calidad del aire. Para ello se emplearon los datos generados por el modelo y se requirió de obtener un campo de vientos lo más parecido al de los datos medidos.

5.6.1. Generación del Campo de Vientos Modificado

Aplicando una idea similar a la de Cavalieri y Bertotti (1997), donde para calcular la altura de las olas, incrementan la intensidad de viento por un factor obtenido a partir de una estación meteorológica cercana al lugar de estudio, se procedió a encontrar un factor multiplicativo para el campo de vientos. A diferencia de los autores anteriores, que contaban con pocos datos medidos, los datos de la RAMA proveían de suficientes estaciones de medición para encontrar el factor multiplicativo α que maximice el valor del índice de concordancia.

$$Ic_j(\alpha) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n_h} (p_{ij}/\alpha - o_{ij})^2}{\sum_{i=1}^n (|p_{ij}/\alpha - \bar{o}| + |o_{ij} - \bar{o}|)^2} \quad (5.1)$$

$$Ic_{MAX} = \text{MAX} \left(\sum_{j=1}^{n_s} Ic_j(\alpha) \right) \Bigg|_{\alpha=0,001}^{\alpha=10} \quad (5.2)$$

Donde:

- Ic_{MAX} – Valor máximo de los índices de concordancia
- Ic_j – Índice de concordancia de la estación j
- α – factor de optimización
- p_{ij} – valor predicho por el modelo para el tiempo i en la
– estación j
- o_{ij} – valor medido para el tiempo i en la estación j
- \bar{o} – valor promedio de las n_h observaciones en la estación j
- n_h – número de horas
- n_s – número de estaciones

El procedimiento empleado fue el siguiente. Primero se calculó el índice de concordancia con los valores obtenidos por el modelo, posteriormente se hizo una búsqueda numérica del factor de optimización (α), en donde a cada valor de magnitud de viento del modelo se dividió por α (ecuación 5.1). Este factor α variaba su valor de 0.001 hasta 10.0 con incrementos de 0.001. Así, para cada valor de α se obtuvo la suma de los valores del

índice de concordancia de todas las estaciones. Finalmente el valor α seleccionado corresponde a aquél cuya suma de índices de concordancia es la mayor para todas las estaciones (ecuación 5.2). En la Tabla 5.12 se presentan los valores de α para cada caso.

Tomado como ejemplo el caso 2, en la Tabla 5.11 y Figuras 5.23 y 5.24 se muestran los resultados obtenidos tanto en los parámetros estadísticos como en la distribución temporal de la magnitud del viento, una vez aplicado el factor α . Nótese como los resultados del modelo meteorológico han mejorado notablemente. Como ejemplo de esto tenemos las estaciones Acatlán (cuyo índice mejora de 0.37 a 0.66), San Agustín (de 0.35 a 0.80), Cerro de la Estrella (de 0.23 a 0.60) y el promedio de las estaciones va de 0.39 a 0.64.

Tab. 5.11: Criterios estadísticos con campo de vientos modificado

Estación	Ic	CC	σ_o	σ_p	RDCM	RDCM _s	RDCM _u	$\frac{RDCM_s}{RDCM}$	$\frac{RDCM_u}{RDCM}$
Tlalnepantla	0.65	0.48	1.03	0.85	0.85	0.75	1.13	0.88	1.33
Acatlán	0.66	0.43	1.01	1.22	0.53	1.10	1.22	2.08	2.31
Xalostoc	0.63	0.38	1.08	0.95	0.78	0.88	1.18	1.13	1.51
San Agustín	0.80	0.71	0.82	1.21	0.04	0.86	0.86	24.49	24.49
C. Estrella	0.60	0.60	0.54	1.10	0.61	0.88	1.07	1.45	1.76
Pedregal*	0.53	0.37	0.45	0.62	0.50	0.58	0.76	1.17	1.54
Plateros	0.55	0.27	0.66	0.68	0.48	0.65	0.81	1.36	1.69
Merced	0.69	0.48	0.80	0.94	0.35	0.83	0.90	2.36	2.56
Hangares	0.70	0.63	1.71	1.00	1.21	0.78	1.44	0.64	1.19
Promedio	0.64	0.48							

El nivel de simulación del modelo se considera alto si $\sigma_p \sim \sigma_o$ y $RDCM \leq \sigma_o$.

Se hizo lo mismo para los otros casos y los resultados se muestran en la Tabla 5.12 se observa que se incrementa el promedio del Ic desde un 25 % hasta en un 56 %.

Tab. 5.12: Factor α , índices de congruencia promedio de vientos originales y con modificación

Caso	α	Ic	Ic modif	%
1	1.85	0.47	0.59	25
2	2.73	0.48	0.64	33
3	2.34	0.37	0.57	56

Una vez que el campo de magnitudes de vientos fue modificado, se efectuaron modelaciones del MCCM incluyendo la parte química. Los resultados de estas corridas se presentan en las Figuras 5.25 y 5.27.

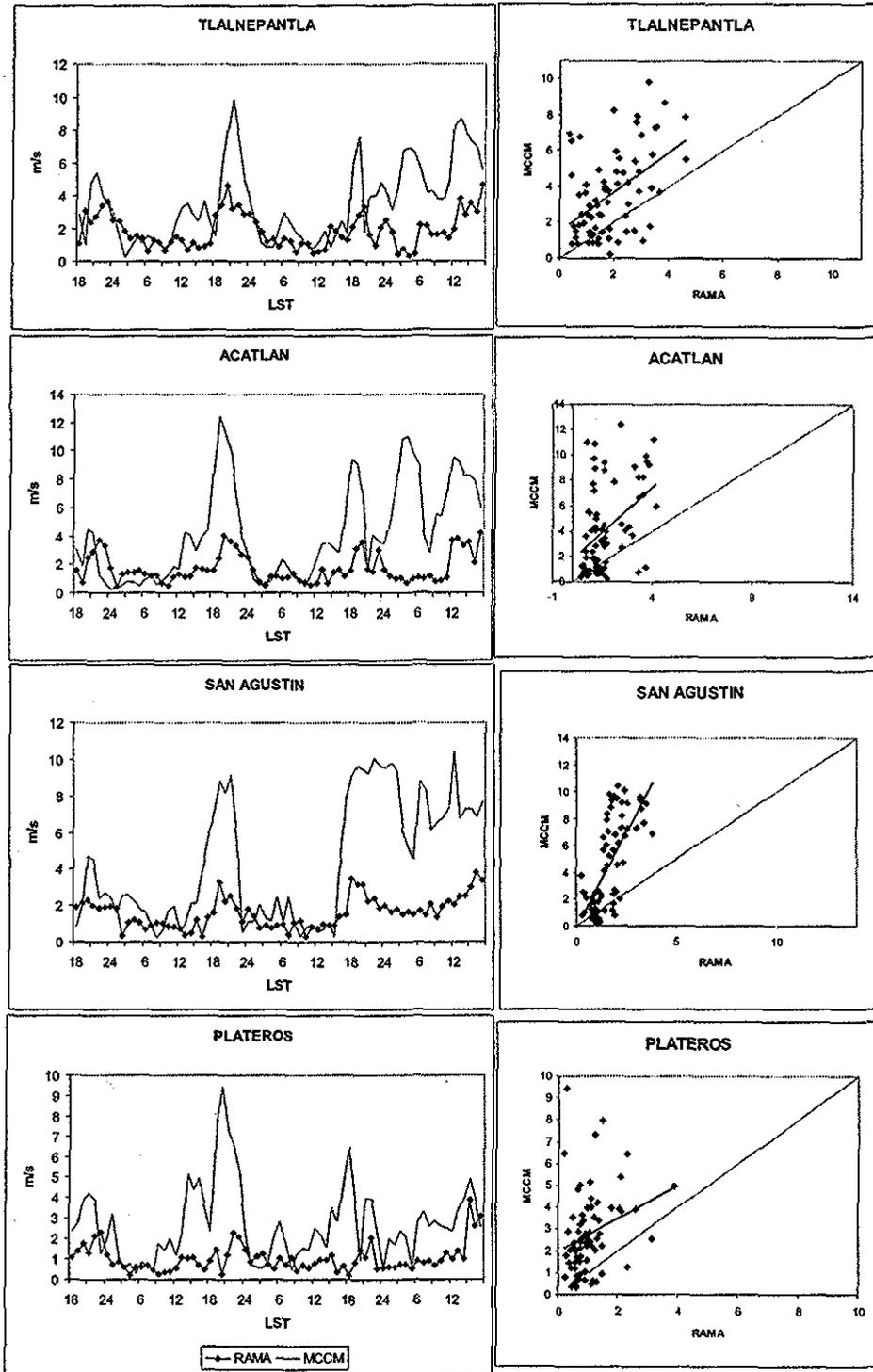


Fig. 5.22: Magnitudes de vientos entre RAMA y MCCM. Series de tiempo (izq) y diagramas de dispersión (RAMA vs MCCM) (der)

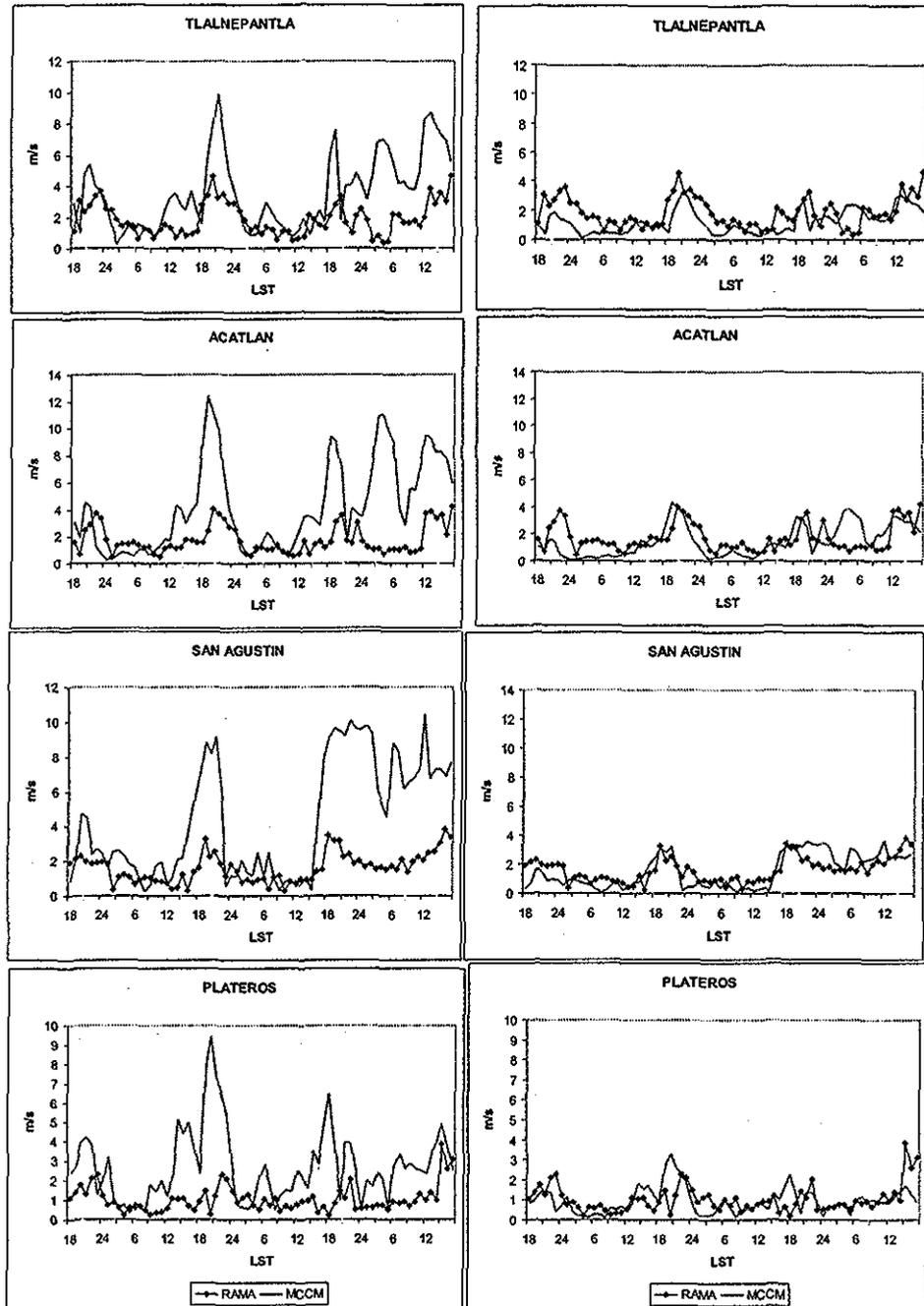


Fig. 5.23: Gráficas de series de tiempo entre las magnitudes de viento [m/s] originales (izq) y modificadas (der).

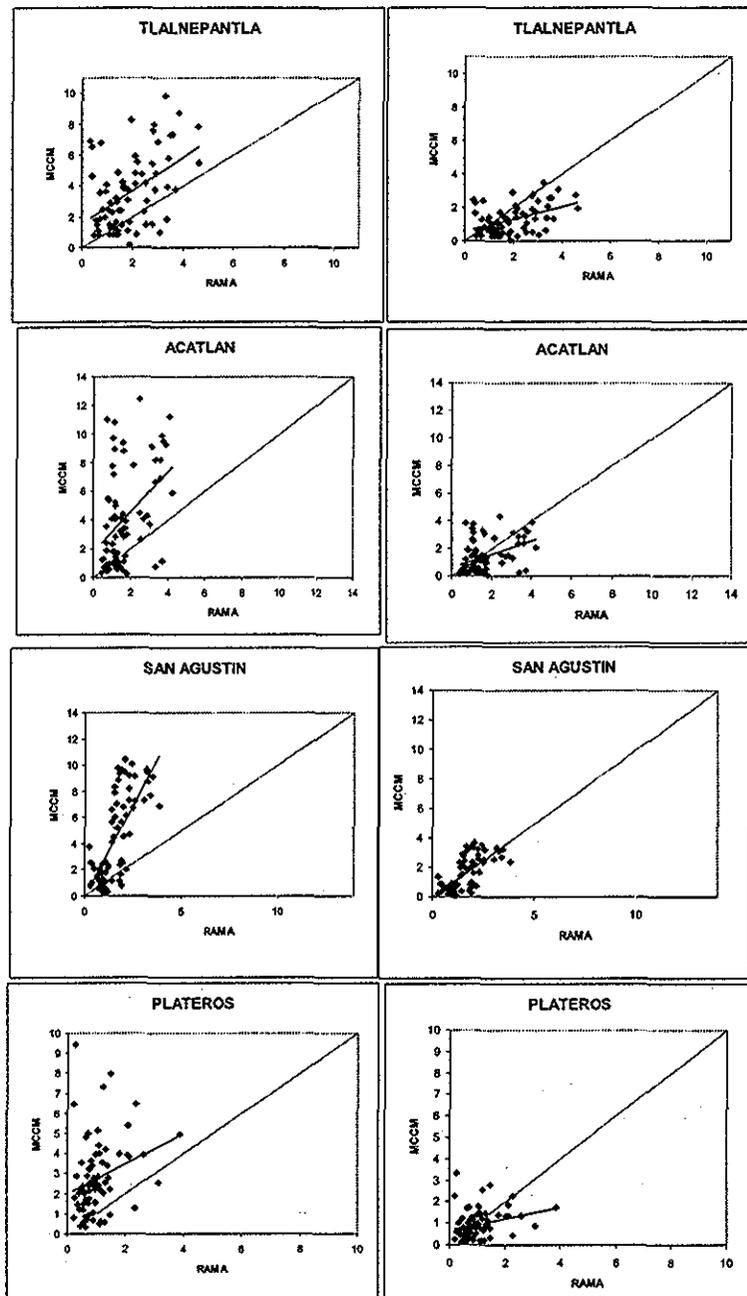


Fig. 5.24: Diagramas de dispersión (RAMA vs MCCM) de magnitudes de viento originales [m/s] (izq) y optimizados (der).

5.6.2. Transporte de Monóxido de Carbono

En la Tabla 5.13 y en la Figura 5.25 se presentan los resultados del monóxido de carbono (CO) para el caso 2. En la Tabla 5.13 se observa que el índice de concordancia en la mayoría de las estaciones se incrementa con el campo de vientos modificado.

Tab. 5.13: Índice de concordancia para concentraciones de CO con campo de vientos original (izq) y optimizado (der)

Estación	Ic orig.	Ic opt.	Estación	Ic orig.	Ic opt.
Lagunilla	0.51	0.55	Plateros	0.67	0.64
Tacuba	0.53	0.57	Hangares	0.56	0.63
Acatlán	0.60	0.69	Iztapalapa	0.50	0.54
Tlalnepantla	0.43	0.38	B Juárez	0.68	0.73
Xalostoc	0.41	0.42	Taxqueña	0.64	0.75
Merced	0.75	0.75	San Agustín	0.42	0.42
Pedregal	0.69	0.76	Azcapotzalco	0.44	0.45
C. Estrella	0.50	0.56	Chapingo	0.43	0.43
Promedio	0.55	0.58			

Se realizaron pruebas para saber si el CO poseía un factor corrección parecido al de los vientos (α) y no se encontró. Se observó que los índices de concordancia con valores superiores a 0.57 en las estaciones al centro (Merced, Hangares, Tacuba) y sur de la ciudad (Pedregal, Plateros, Taxqueña, Benito Juárez) y valores entre 0.38 y 0.56 en las estaciones al norte (Chapingo, Xalostoc, San Agustín, Tlalnepantla) y al este (C. Estrella, Iztapalapa). Lo anterior nos indica que los resultados del modelo en estas áreas posee una mayor diferencia con los datos medidos y puede deberse a que no se tienen descritas adecuadamente las emisiones localizadas viento arriba de estas estaciones que corresponden principalmente a áreas del Estado de México en la ZMVM.

Tab. 5.14: Ic para el CO con campo de vientos original y modificado

Caso	Ic	Ic (vientos corregidos)
1	0.44	0.43
2	0.55	0.58
3	0.47	0.47

Aunque existe un incremento en el Ic para el CO al emplear el campo de vientos modificado, este valor puede incrementarse mejorando el inventario de emisiones para el CO, principalmente en las regiones que corresponden al estado de México.

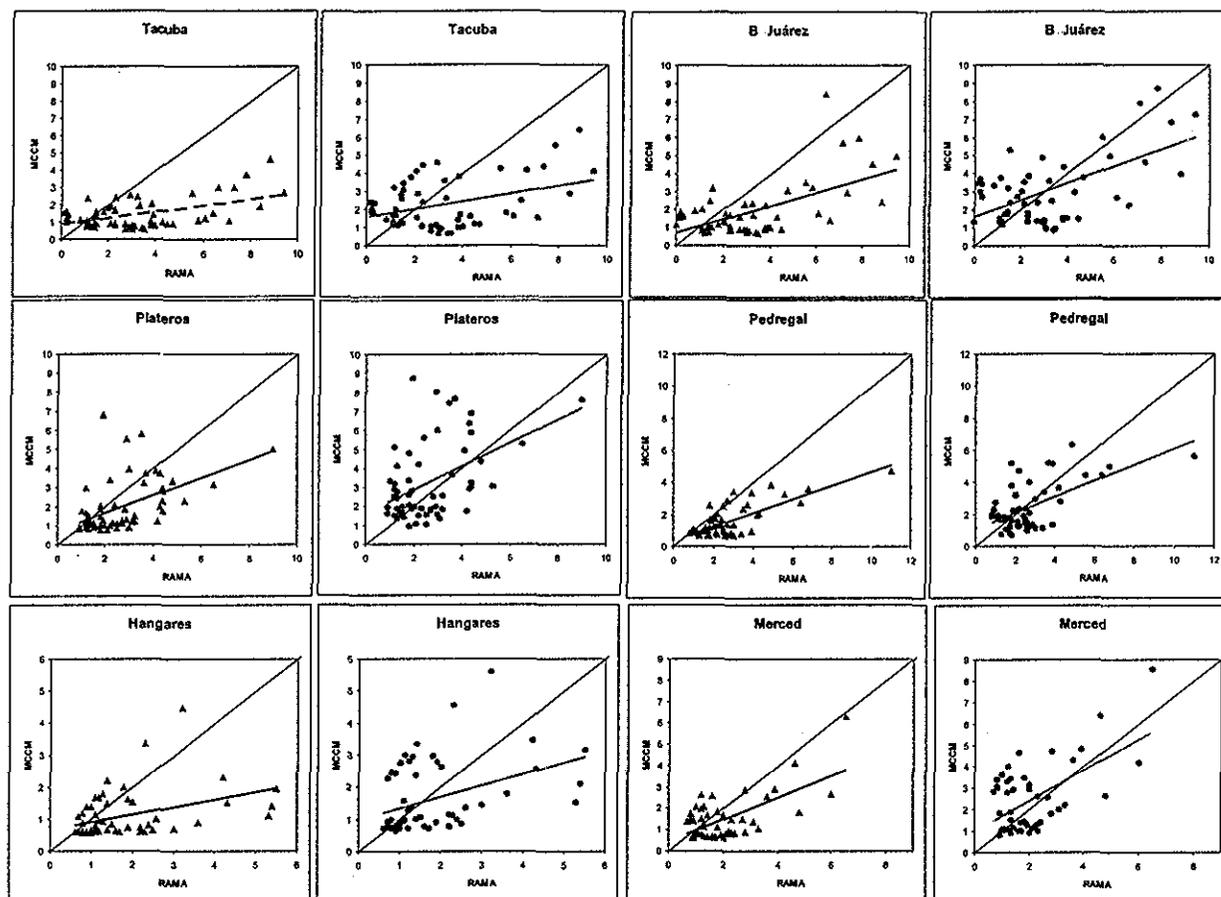


Fig. 5.25: Diagramas de dispersión (RAMA vs MCCM) de concentraciones de CO [ppm]. Original (cols 1, 3) y con optimización (cols 2, 4).

5.6.3. Fotoquímica

En la Figura 5.26 se muestra la concentración de ozono en varias estaciones de la RAMA, comparando mediciones y resultados de la modelación antes y después de aplicar el factor multiplicativo α al campo de vientos del caso 2. En la Tabla 5.15 se muestran las estadísticas para la concentración de ozono (O_3) antes y después de realizar la modificación del campo de vientos. El Ic se incrementa entre un 1.5% al 21% y en promedio es del 11%, con esto el modelo reproduce mejor las concentraciones de O_3 para este evento.

En estos resultados también se observa que la estación Xalostoc (al norte) e Iztapalapa (al este) poseen un Ic bajo con respecto a las demás estaciones, esto puede deberse al inventario de emisiones de NO_x y de COV de fuentes móviles provenientes del Estado de México.

En la Tabla 5.16 se presentan las variaciones en el Ic del ozono al em-

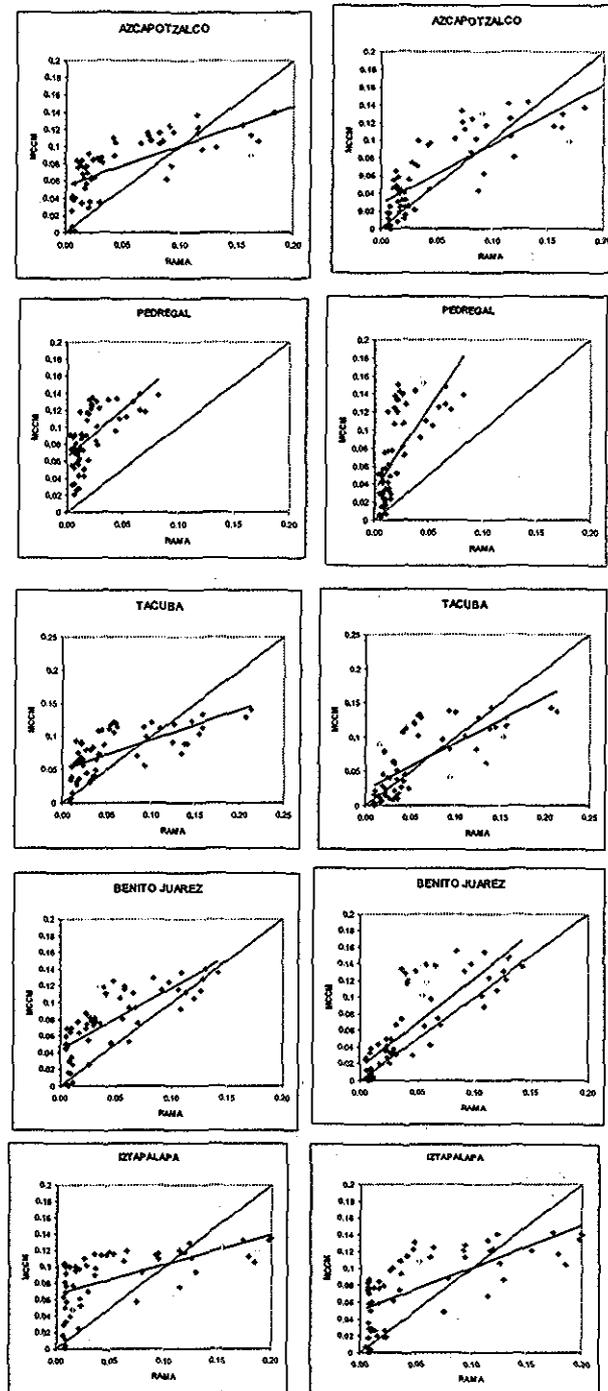


Fig. 5.26: Diagramas de dispersión (RAMA vs MCCM) de concentraciones de O_3 [ppm]. Original (izq) y con optimización (der).

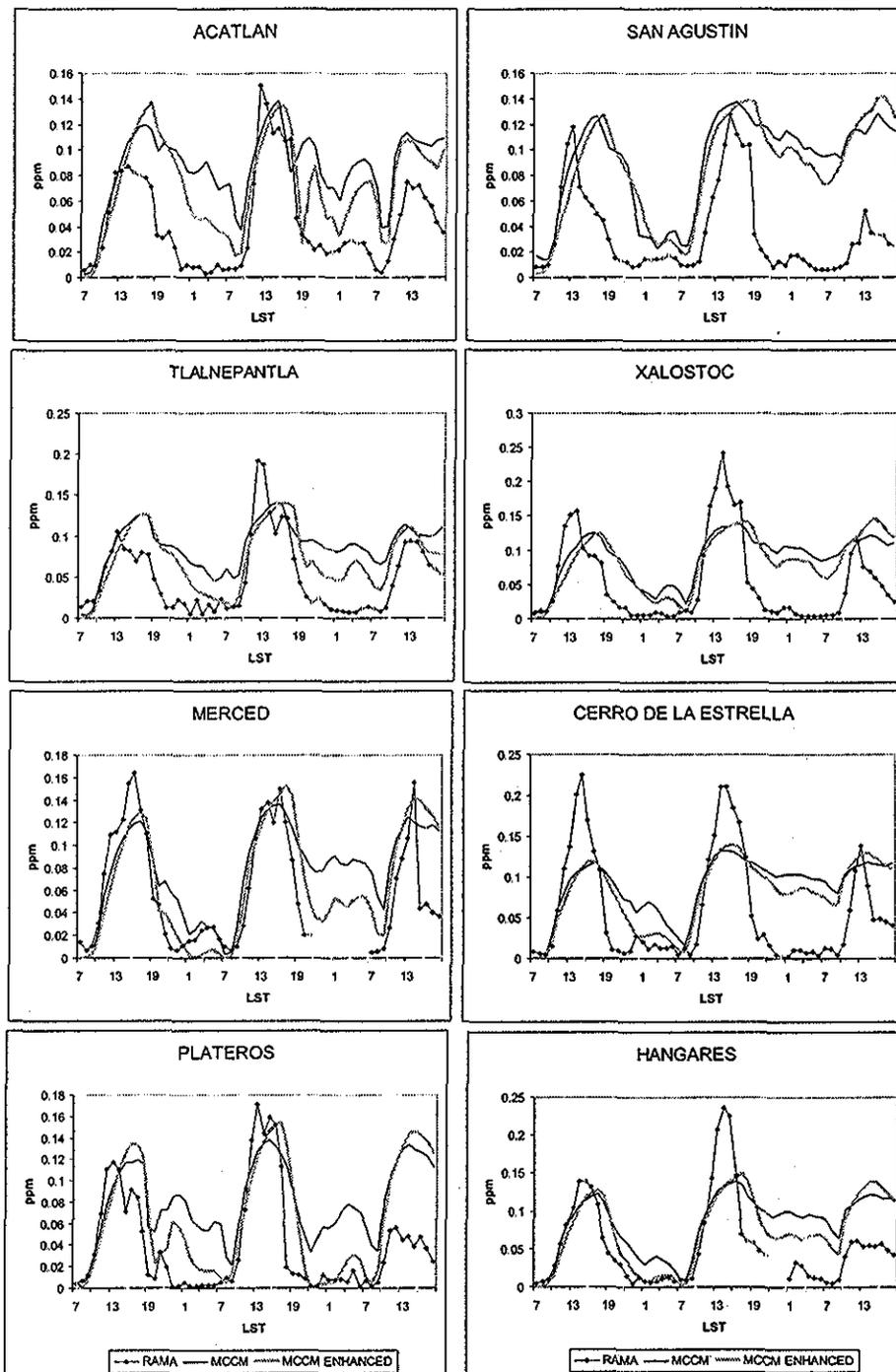


Fig. 5.27: Variación horaria de concentraciones de O₃ [ppm] datos de RAMA, MCCM y MCCM con vientos modificados.

Tab. 5.15: Índice de concordancia para concentraciones de O₃ [ppm] con campo de vientos original (izq) y optimizado (der)

Estación	Ic		Estación	Ic	
	no opt.	opt		no opt.	opt
Lagunilla	0.81	0.84	C. Estrella	0.66	0.74
Tacuba	0.76	0.85	Plateros	0.69	0.79
Acatlán	0.62	0.75	Hangares	0.73	0.78
Azcapotzalco	0.76	0.87	Iztapalapa	0.68	0.77
Ilalnepantla	0.68	0.80	B. Juárez	0.75	0.84
Xalostoc	0.67	0.68	Taxqueña	0.76	0.81
Merced	0.85	0.88	Ilalpan*	0.57	0.67
Promedio	0.71	0.79			

* Con el 70 % de los datos de la RAMA

plear el campo de vientos optimizado, se aprecia que el incremento va de 1 % a 11 %. La desviación obtenida en las concentraciones de O₃ debido a una sobreestimación en la magnitud de los vientos puede ser muy importante en algunas estaciones, y estadísticamente significativo para el conjunto de estaciones.

Tab. 5.16: Ic para el O₃ con campo de vientos original y optimizado

Caso	Ic	Ic (opt)	%
1	0.83	0.84	1
2	0.71	0.79	11
3	0.75	0.81	8

5.6.4. Discusión

El efecto de una sobrestimación del campo de vientos causa que exista una mayor dilución de las emisiones, ya que se dispersan más rápidamente los contaminantes. Para el caso de CO, esta dilución provoca concentraciones más bajas (comparadas contra datos medidos) durante todo el día. En el caso de O₃ se observaron dos efectos. El primero es una disminución de las concentraciones modeladas durante la mañana y el mediodía comparadas contra las medidas. El segundo efecto se presenta durante las horas de la tarde y noche, cuando las concentraciones modeladas de ozono permanecen relativamente altas contra las observaciones. Esto se debe principalmente a la dilución de los contaminantes primarios. Durante la horas de luz es la dilución de hidrocarburos fotoquímicamente reactivos que inducen la formación de ozono y durante las horas de obscuridad la del NO que reacciona principalmente con el O₃ haciendo que disminuya su concentración.

Para el caso estudiado el Ic mejoró en un 11 %, en las estadísticas de

error y por ende una mejora notable en el comportamiento del MCCM para modelar el ozono y otros contaminantes.

5.7. Conclusiones

El módulo meteorológico proporciona una buena descripción de la meteorología en la región de estudio. Aunque sobreestima la magnitud de viento, esto llega a producir que los resultados en el índice de concordancia para el ozono puedan ser menores en un 11 % con respecto a un campo de vientos cuya magnitud sea más cercana a la medida.

En este punto se puede trabajar en dos aspectos. El primero es adecuar la parametrización de Burk-Thompson con el fin de que pueda realizar la asimilación de datos y el transporte de contaminantes. En el segundo, se requiere que el modelo describa mejor el perfil de vientos sobre la superficie, esto se puede realizar mediante el estudio y comprensión más detallada de los procesos turbulentos en superficie que nos proporcionen nuevas parametrizaciones (Por ejemplo, la inclusión de un modelo de capa superficial) o en su defecto, implementar un esquema usado en otros modelos. Ambos puntos se encuentran fuera del ámbito de los objetivos de este trabajo.

El procedimiento propuesto para optimizar el Ic del campo de vientos, provee un método para calibrar el modelo MCCM y mejorar su desempeño, es la primera vez que se propone para un modelo de este tipo.

Los resultados obtenidos de las concentraciones de CO y O₃ a partir de la modificación en el campo de vientos proporcionan las mejores concordancias con respecto a otros estudios realizados en el área con modelos similares (ver Williams et al , 1992).

De los resultados obtenidos para el CO y el O₃ se observa que el inventario de emisiones posee una calidad desigual ya que debe mejorarse en las áreas que competen al Estado de México.

El acoplamiento entre la química y la meteorología influyó para que no se requiriera de efectuar modificaciones a los inventarios de emisiones de hidrocarburos en el área.

6. APLICACIONES

En este capítulo se presentan dos aplicaciones del MCCM en la región central de México. Una de ellas estudia el efecto en la calidad del aire por el cambio de uso de suelo y la otra evalúa el efecto en la calidad del aire debido a una reducción importante en las emisiones provenientes de termoeléctricas cercanas a la ZMVM.

6.1. Efecto por Regeneración de los Lagos

Utilizando el modelo MCCM se muestra cómo la regeneración parcial de la zona lacustre en Texcoco tiene un efecto benéfico a nivel local, reduciendo la amplitud de las concentraciones de ozono.

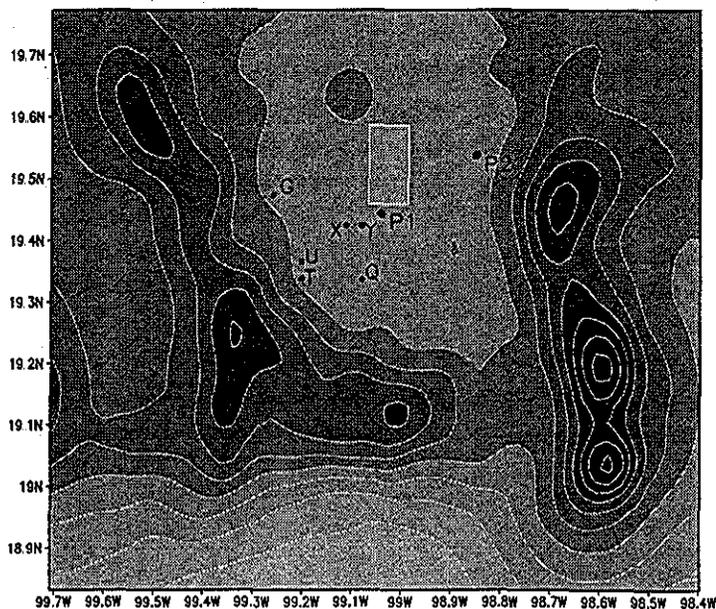


Fig. 6.1: Topografía y localización del lago mostrada por el rectángulo. Las estaciones de la RAMA empleadas para la comparación son Acatlán (G), Estrella (Q), Merced (X), Pedregal (T), Plateros, (U) y Hangares (Y). Los sitios P1 y P2 son puntos en superficie escogidos para comparar los resultados del modelo.

En la Figura 6.1 se muestra la topografía y la localización del lago de 9×15 km en el Noreste de la ZMVM. El período durante el cual se realizaron los experimentos computacionales es del 25 al 28 de febrero de 1997. Durante estos días, se generó un episodio de alta contaminación.

Se utilizó la técnica de dominios anidados como se muestra en la Figura 5.3. El dominio externo tiene una resolución de 27 km, el siguiente de 9 km, y el tercero de 3 km. En este último dominio, no fueron utilizadas las parametrizaciones de nubes y fue ahí donde se utilizó el módulo de fotoquímica.

Se realizaron dos experimentos computacionales: El primero consistió en simular con el modelo empleando el uso de suelo actual, mientras que en el segundo se formó un lago virtual, colocando un cuerpo de agua como se muestra en la Figura 6.1. Para ambos casos, se utilizan las mismas condiciones de frontera e iniciales para el dominio externo.

El propósito del primer experimento es mostrar cómo MCCM es capaz de reproducir satisfactoriamente el fenómeno de contaminación atmosférica en la región.

6.1.1. Primer Experimento: Uso de Suelo Actual

Las Tablas 5.3 y 5.6 muestran el estudio estadístico de error para temperaturas e intensidad de viento, respectivamente. La información utilizada proviene de una selección típica de estaciones de la RAMA.

El índice de congruencia, I_c para temperaturas posee valores arriba de 0.90 y llega a tener valores de 0.95 en estaciones Hangares y Merced. Estas dos estaciones son las dos más cercanas a la región donde se pretende formar el lago virtual. Para la intensidad del viento, los valores de I_c llegan a sus valores más altos en las estaciones Hangares y Merced, cercanas a la región de Texcoco. Resultados igualmente satisfactorios se encontraron para las otras estadísticas.

La Figura 5.11 muestra una serie de tiempo de temperaturas superficiales medidas y calculadas para un conjunto típico de estaciones de la RAMA. La Figura 6.2 muestra una serie de tiempo comparando concentraciones de O_3 calculadas y medidas para las mismas estaciones. Estas figuras y el estudio estadístico muestran que MCCM reproduce satisfactoriamente la meteorología y contaminación atmosférica de la ZMVM.

6.1.2. Segundo Experimento: El Lago Virtual

Un lago virtual de 9×15 km se simula en la región de Texcoco, como se muestra en la Figura 6.1. La temperatura del lago es de $15^\circ C$, que corresponde a la temperatura para el mes de febrero del lago Nabor Carrillo, (Martínez, 1999)

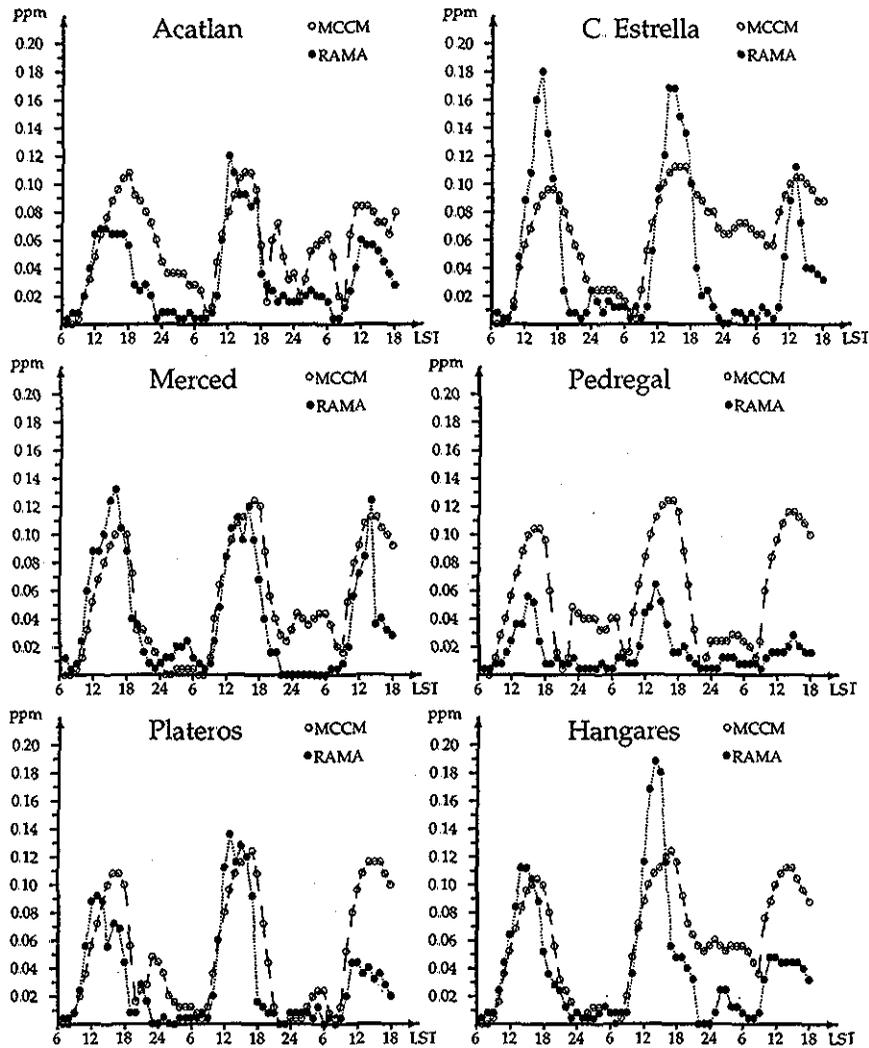


Fig. 6.2: Concentraciones de O₃ en ppm para 60 horas usando datos de MCCM y mediciones de algunas estaciones seleccionadas de la RAMA.

Como consecuencia de la presencia del lago se crea el fenómeno de brisa tierra-agua, debido al contraste de temperatura entre el cuerpo de agua y la tierra. En la Figura 6.3 se aprecia como el promedio del viento superficial de las 10:00 a las 15:00 LT presenta un patrón radial hacia afuera del lago. La presencia del lago modula la temperatura, o sea, debido a la presencia del lago, los valores extremos de temperatura durante el ciclo diurno son reducidos.

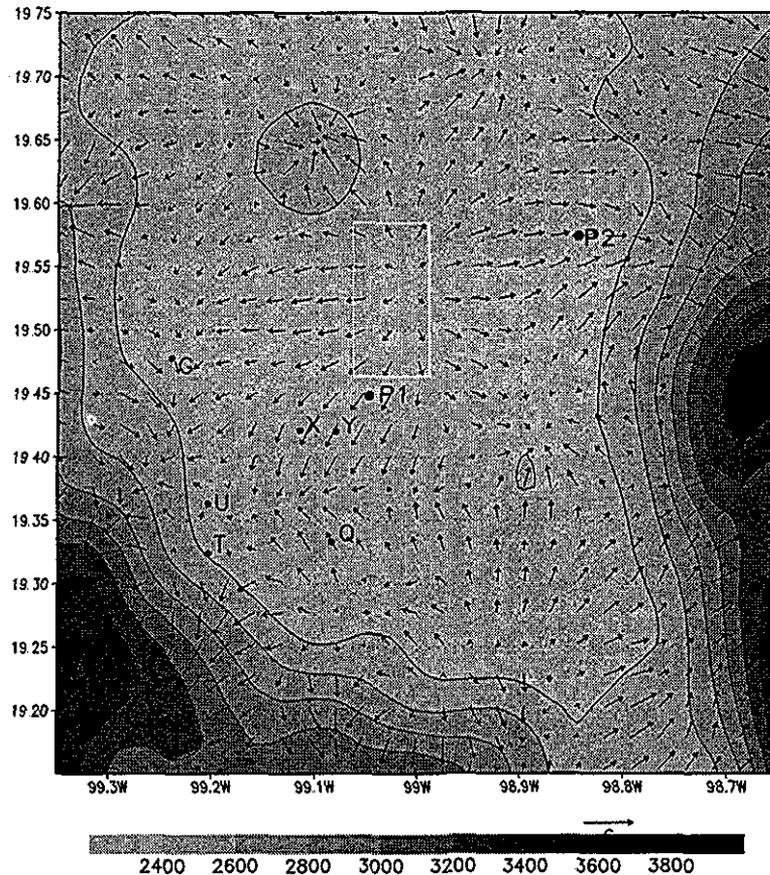


Fig. 6.3: Campo de viento superficial [m/s] de las 10:00 a las 15:00 LT para el segundo día de modelado con la presencia del lago. Nótese que el efecto lago-tierra que producen un efecto radial que sale del lago.

La Fig. 6.4 muestra una comparación de temperaturas con y sin la presencia del lago en el punto de prueba P1 a 3 km del lago y el punto de prueba P2 aproximadamente a 10 km al Noreste del lago mostrado en la Fig. 6.1. La serie de tiempo de temperaturas muestra cómo la presencia del lago es modulada en estos puntos, aunque el efecto es dependiente de la dirección del viento.

En la Figura 6.5 se muestra la diferencia de temperaturas promedio con

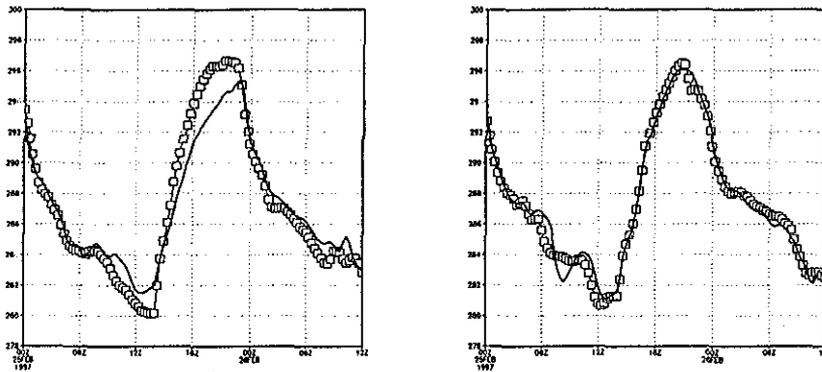


Fig. 6.4: Serie de tiempo de la temperatura [K] con (—) y sin lago (\square) en P1 a la izquierda y en P2 para 36 horas comenzando a las 00:00 LT del segundo día de modelado. El efecto de modulación por efecto del lago es más obvia en el punto P1.

y sin lago para el segundo día de modelación de las 10:00 a las 15:00 LT. Esta figura muestra el área cuya temperatura es influenciada por la presencia del lago para este día.

La Figura 6.6 muestra una comparación de concentraciones de ozono [ppm] (O_3) en los mismos puntos de prueba P1 y P2 con y sin lago. Se aprecia que las concentraciones de O_3 también han sido moduladas. La Figura 6.7 muestra la diferencia del promedio de concentraciones de O_3 con y sin lago, para el segundo día de modelación de las 10:00 a las 15:00 LT.

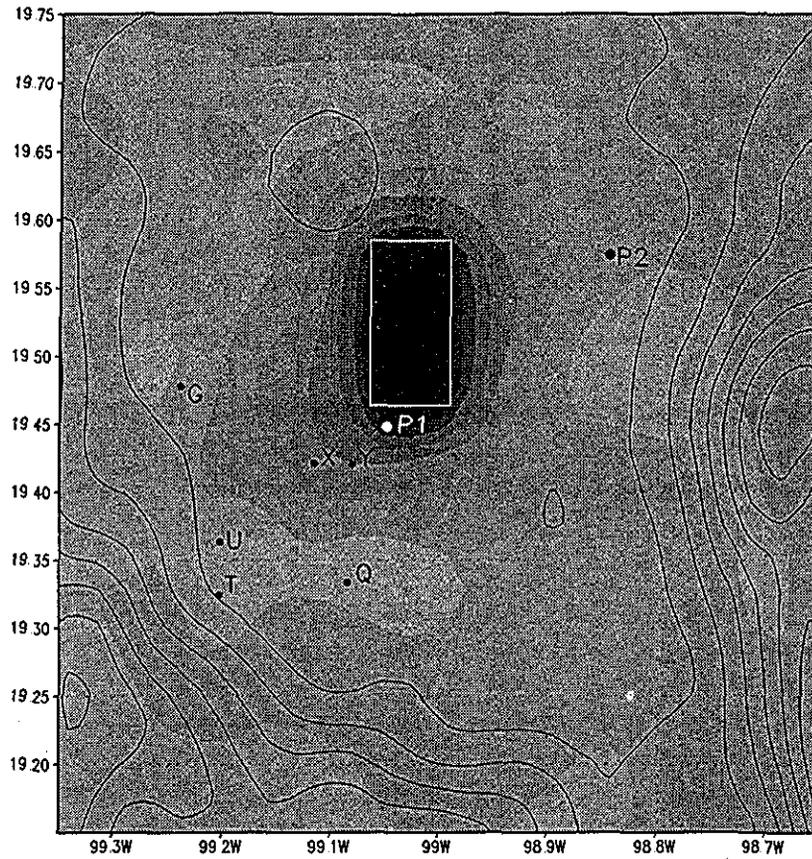


Fig. 6.5: Promedio de temperatura superficial [K] modelada para el período de las 10:00 a 15:00 LT para el segundo día de modelación con la presencia del lago.

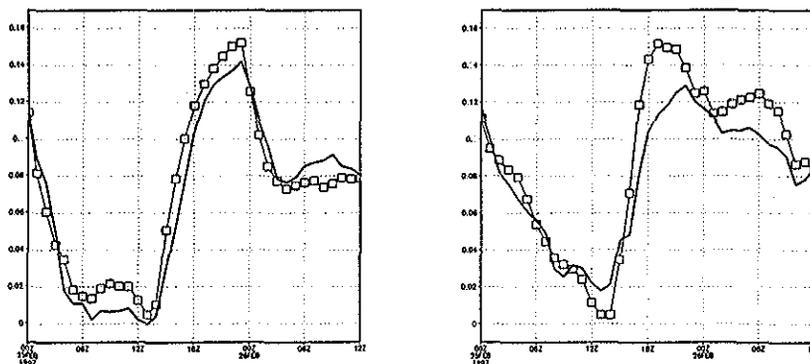


Fig. 6.6: Concentraciones modeladas de O_3 en ppm con (·) y sin lago (□) en P1 a la izquierda y P2 para 36 horas iniciando a las 00:00 LT del segundo día. En ambos sitios el O_3 se modula. En el sitio P2 se alcanzó una reducción relativamente alta en el pico de ozono.

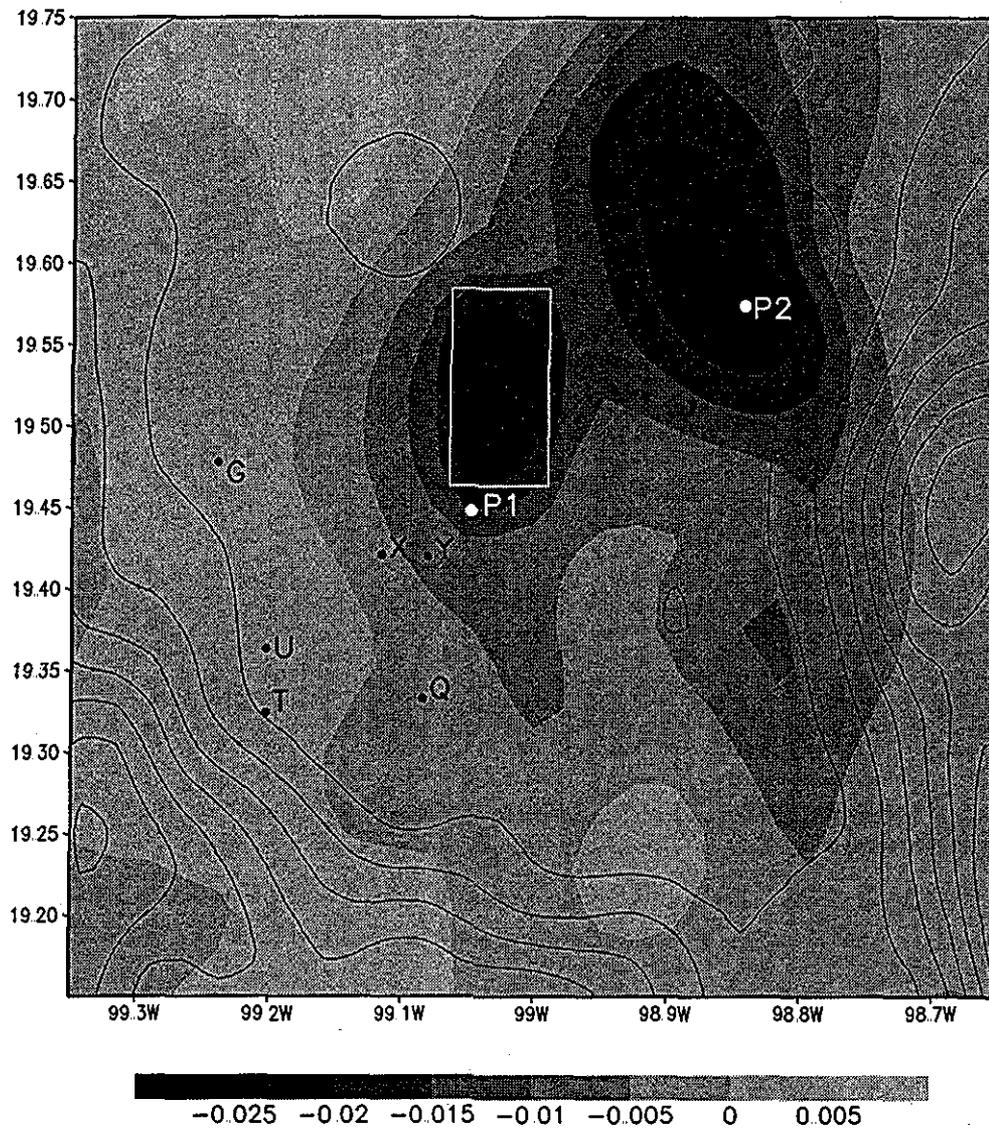


Fig. 6.7: Figura ampliada donde se muestran las diferencias entre las concentraciones superficiales promedio de O_3 en ppm con y sin lago para las 10:00 a 15:00 LT del segundo día de modelación. Se observa al noreste una área relativamente grande donde existe una reducción significativa de las concentraciones de O_3 debidas a la presencia del lago virtual.

6.1.3. Conclusiones

Dos efectos se llevan a cabo por la presencia del lago: la brisa tierra-agua y modulación de temperatura. El efecto de brisa tierra-agua tiende a dispersar contaminantes ya que aire menos contaminado que esta sobre el lago es advectado radialmente, como claramente se muestra en la Figura 6.3

A pesar de que los cambios de temperatura no son severos (hasta 2°C), tienen una influencia en concentraciones de O₃, ya que decrece la reactividad de reacciones moleculares de segundo orden con el decrecimiento de temperatura, mientras que reacciones moleculares de tercer orden (reacciones de terminación de cadenas) aumentan su reactividad con el decrecimiento de temperatura. Entonces, temperaturas bajas tienden a retrasar y reducir los picos de O₃, y viceversa, cuando las temperaturas aumentan (Mulcahy, 1973).

Los resultados obtenidos para este período muestran que, para el segundo día de modelación, una reducción en el máximo de O₃ de aproximadamente 7% en el Sur del lago donde el punto de prueba P1 se localiza, pero una reducción importante en el máximo de concentraciones de O₃ del 20% se presenta en la región Noreste del lago, donde se localiza el punto P2, como se muestra en la Figura 6.7. Para otros días con patrones de viento diferentes otras áreas son afectadas. El caso aquí presentado es típico para un día con velocidades de viento bajas.

La influencia del lago es benéfica ya que los extremos de concentraciones de O₃ se han reducido en algunas áreas y, aunque las concentraciones nocturnas tienden a incrementarse, estas están lejos de los valores de la norma de calidad del aire (11 ppm para 8 horas de exposición).

Regiones donde la modulación en las concentraciones superficiales de O₃ es significativa están sobre el lago y llegan hasta unos 10 o 15 km del lago. Estas áreas varían de tamaño y localización dependiendo de la dirección del viento. El efecto es local, pero en nuestro caso incluye áreas densamente pobladas.

Debido al efecto de modulación en las concentraciones de O₃, la recuperación del Lago de Texcoco tiene un impacto positivo en una región localizada pero densamente poblada. Este resultado muestra el efecto benéfico debido a la presencia de cuerpos de agua cerca de la región metropolitana. Este es un factor importante para la planeación de la ciudad.

6.2. Contaminación Atmosférica Debida al Sector Energético

Empleando MCCM se muestra que existe un impacto en la calidad del aire en el Valle de México debido a las emisiones de industrias del sector energético. Entre estas industrias se encuentran las termoeléctricas Valle de México, Jorge Luque, Francisco Pérez Ríos (Tula), la Unidad Petroquímica Tula y la Refinería Miguel Hidalgo.

En la Figura 6.8 se muestra la región de estudio y la localización de las fuentes puntuales. El período en el cual se realizaron las modelaciones son del 3 al 5 de marzo de 1997, (caso 3). Durante estos días, se generó un episodio de alta contaminación, caracterizado por un sistema de alta presión y vientos provenientes del norte.

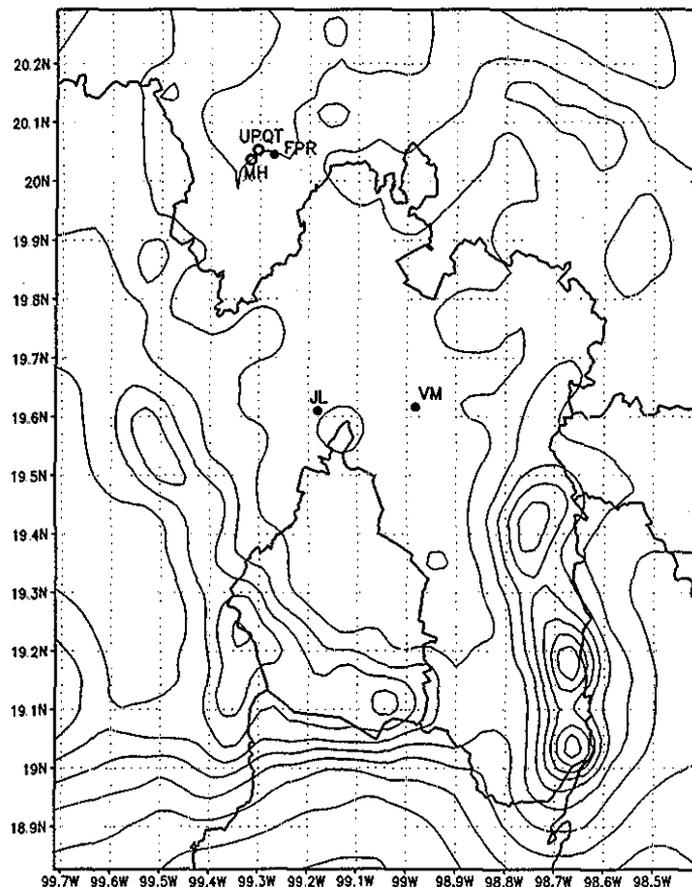


Fig. 6.8: Localización de las termoeléctricas (●) Jorge Luque (JL), Valle de México (VM), Felipe Pérez Ríos (FPR), las petroquímicas (○) Miguel Hidalgo (MH) y Tula (UPQT) en la región de estudio.

6.2.1. Procedimiento

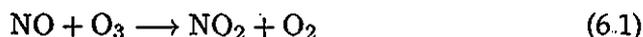
Se efectuó un experimento del tipo encendido-apagado. Después de realizar la calibración y aplicando el factor para la calibración de la magnitud de viento ($\alpha = 2.34$) para el período seleccionado se efectuaron dos ensayos. En el primer ensayo se emplearon las emisiones actuales de las fuentes puntuales. En el segundo se eliminaron las emisiones de las fuentes puntuales del sector energético, las tres termoeléctricas, la unidad petroquímica y la refinería Miguel Hidalgo. En ambos ensayos se corrió el segundo y tercer dominio con la fotoquímica y emisiones. Así los resultados obtenidos del segundo dominio proporcionan al tercer dominio las concentraciones iniciales y de frontera de las especies químicas.

El episodio meteorológico empleado presenta períodos donde el viento proviene del noroeste y norte. Las fuentes puntuales se encuentran en esas direcciones, como se aprecia en la Figura 6.9.

6.2.2. Resultados

A la concentración obtenida con las fuentes puntuales se le restó la concentración obtenida por el ensayo sin las fuentes, con esta información se formaron las figuras que se muestran a continuación.

En la Figura 6.10 se muestran las diferencias entre las concentraciones superficiales de ozono O_3 en ppm con y sin fuentes puntuales para las 20:00 LT del 4 Marzo 1997 (segundo día de modelación). Se observa como se reduce el ozono debido a la presencia de NO emitido por la termoeléctrica Valle de México, al noreste de la ciudad. Esta reducción es debida a que la emisión principal de estas fuentes es de NO_x , el cual consta de un 90 % de NO y 10 % de NO_2 . La reacción principal que ocurre cerca de la fuente es:



lo cual hace que disminuya la concentración de O_3 viento abajo de la emisión. Por otro lado se espera un incremento en el NO_2 en el mismo trayecto.

En la Figura 6.11 se aprecia cómo se incrementa la concentración del bióxido de nitrógeno NO_2 viento a bajo de la fuente termoeléctrica Valle de México.

Los gases criterio que se tomaron en cuenta son el monóxido de carbono (CO), ozono (O_3), óxidos de nitrógeno (NO_x) y bióxido de azufre (SO_2). Como se mencionó, actualmente el O_3 se presenta como el gas contaminante que con mayor frecuencia viola la norma ambiental. Como se verá más adelante, este lugar podrá ser tomado en el futuro por el NO_2 que junto con el SO_2 también verá incrementada su importancia.

Aunque el CO es un gas que se encuentra dentro de la norma ambiental, es útil para estimar la cantidad de carbón negro (CN) y partículas $PM_{2.5}$

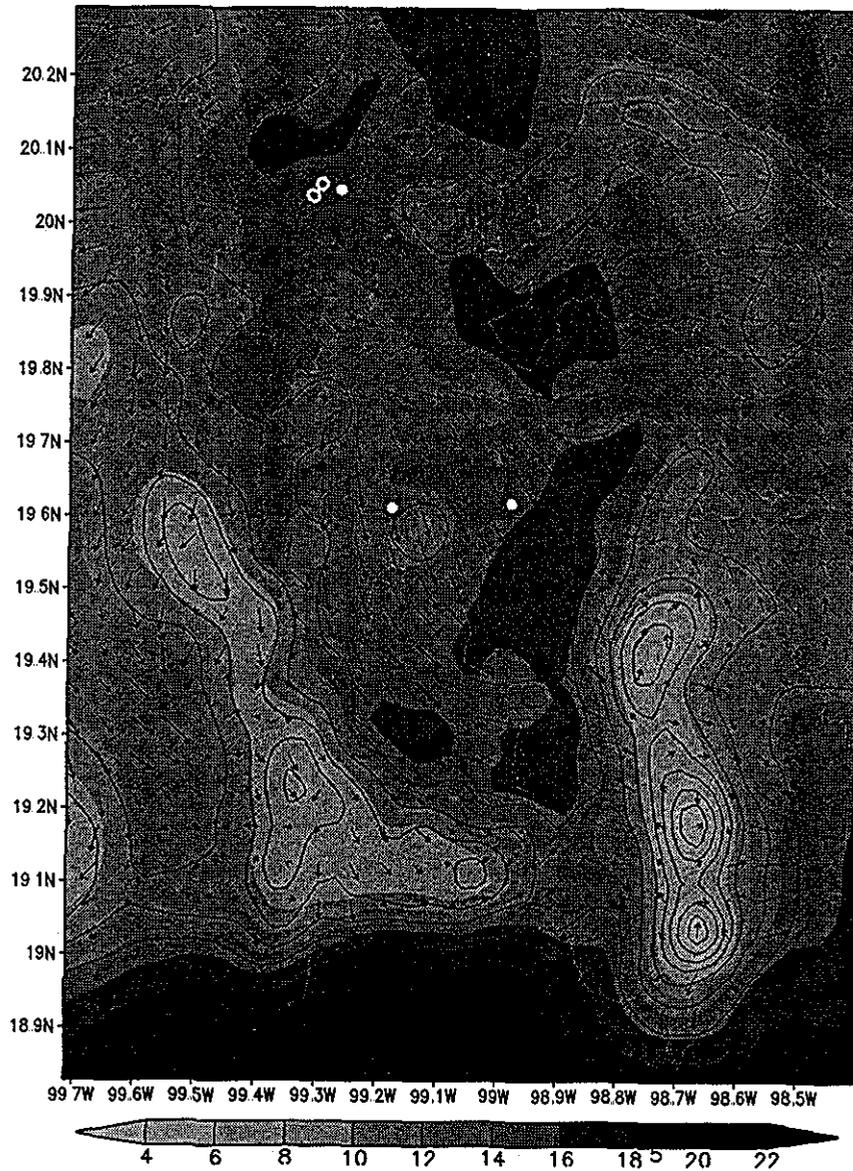


Fig. 6.9: Se muestran las temperaturas [K] y magnitudes de viento [m/s] para las 20:00 LT del 4 Marzo 1997 (segundo día de modelación). Se observa como el patrón de flujo transporta las emisiones de la termoeléctrica hacia la ciudad.

presentes en la atmósfera utilizando fórmulas empíricas desarrolladas para la Ciudad de México, (Peralta, 2001). Así, tenemos que para estimar la concentración de carbón negro usando la fórmula:

$$CN(mg/m^3) = 0.80 \times CO(mg/l) + 0.24 \quad (6.2)$$

donde se especifican las unidades de concentración entre paréntesis. Se estima que la masa de partículas $PM_{2,5}$ es un tercio de la masa de CN.

Además, se estimaron los compuestos químicos generadores potenciales de partículas que incluyen ácidos sulfúrico y nítrico, además de compuestos orgánicos polares. También, la reactividad de la atmósfera se estimó a partir de formaldehído (HCHO) y óxidos de nitrógeno reactivos (NO_y).

Para cuantificar el efecto de los gases criterio, y poder hacer el estudio comparativo de forma más objetiva se utilizan tres métricas (Georgopoulos y Arunachalam, 1997): extensión (E_{c^*}), severidad (S) y exposición potencial integrada de la población (Ψ).

Extensión E_{c^*} suma los elementos de malla que durante el episodio han sobrepasado la norma de contaminación para cada gas y se calcula mediante la fórmula:

$$E_{c^*} = \sum_{n=1}^m N_{c^*,n} \quad (6.3)$$

donde $N_{c^*,n}$ es el número de celdas que exceden una concentración c^* , durante m horas de duración del episodio.

Severidad S suma las veces que las concentraciones de un gas criterio han sobrepasado la norma ambiental y se calcula mediante el siguiente procedimiento:

$$S = \sum_{n=1}^m \sum_{i,j} c_{i,j,n} H_{i,j}(c^*) \quad (6.4)$$

donde

$$H_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } c_{i,j} > c^* \\ 0 & \text{si } c_{i,j} < c^* \end{cases} \quad (6.5)$$

y $c_{i,j,n}$ es la concentración en la celda i, j al tiempo n . Las unidades son las correspondientes al gas criterio.

Exposición Ψ cuantifica la magnitud de la exposición en tiempo y espacio, incorporando el tamaño de la población potencialmente expuesta a niveles no saludables de algún gas criterio y se calcula mediante la fórmula:

$$\Psi = \frac{\sum_{n=1}^m \sum_{i,j} \bar{w}_{i,j,n} c_{i,j}}{m \bar{w}_{max}} \quad (6.6)$$

donde $\bar{w}_{i,j,n}$ es la población en la celda i, j y \bar{w}_{max} es la población máxima en la región de estudio.

Mientras mayor sea el valor de estas métricas, peor será la calidad del aire. Las normas de concentración que se utilizaron fueron las de la Organización Mundial de la Salud, que coinciden con las normas ambientales mexicanas en muchos casos. Así se tiene que para el ozono (O_3) la norma horaria usada fue de 0.10 ppm, para el bióxido de azufre (SO_2) de 0.13 ppm y de monóxido de carbono (CO) de 26 ppm. Para el caso de partículas, formaldehído y óxidos de nitrógeno reactivos, solamente se consideró la exposición, ya que no se cuenta con normas ambientales para estos compuestos.

Es importante notar que debido a la no-linealidad en las ecuaciones de la fotoquímica, la relación de emisiones de COV/ NO_x puede ser tal que aún cuando las emisiones de estos gases precursores se incrementan, la concentración de O_3 puede decrecer, es decir, una mayor emisión de gases contaminantes precursores de O_3 puede resultar en la disminución de O_3 . Por esta razón se tiene que tener cuidado cuando se hace una comparación utilizando sólo NO_x y O_3 como gases criterio y tomar en cuenta que los resultados de la modelación son muy sensibles al inventario de emisiones generado

Tab. 6.1: Valores de la métrica exposición para los casos con emisiones de fuentes puntuales y sin fuentes puntuales

Exposición al	Con fuente	Sin fuente	Variación %
Monóxido de carbono [CO]	0.00000	0.00000	0
Ozono [O_3]	0.00431	0.01210	181
Bióxido de nitrógeno [NO_2]	0.11400	0.00010	-100
Monóxido de nitrógeno [NO]	0.43710	0.09071	-79
Oxidos de nitrógeno reactivos [NO_y]	0.63680	0.16350	-74
Formaldehído [HCHO]	0.00445	0.00345	-22
Partículas Potenciales [PP]	0.01006	0.01060	5
Bióxido de azufre [SO_2]	0.02003	0.01998	0

En todos los casos el monóxido de carbono no sobrepasó los límites de la norma de calidad del aire por lo que no se tiene exposición, severidad y extensión para dicho gas.

Como se puede apreciar en la Tabla 6.1 donde se presentan los valores de la métrica exposición potencial, no se rebasa la norma para el CO y existe un incremento en el O_3 y las partículas potenciales. Por otro lado se observa un decremento en los compuestos de nitrógeno y en el formaldehído, mientras que el bióxido de azufre se mantiene constante. Las variaciones que se tienen en la mayoría de los casos son negativas. Éstos valores se pueden apreciar en la Figura 6.12

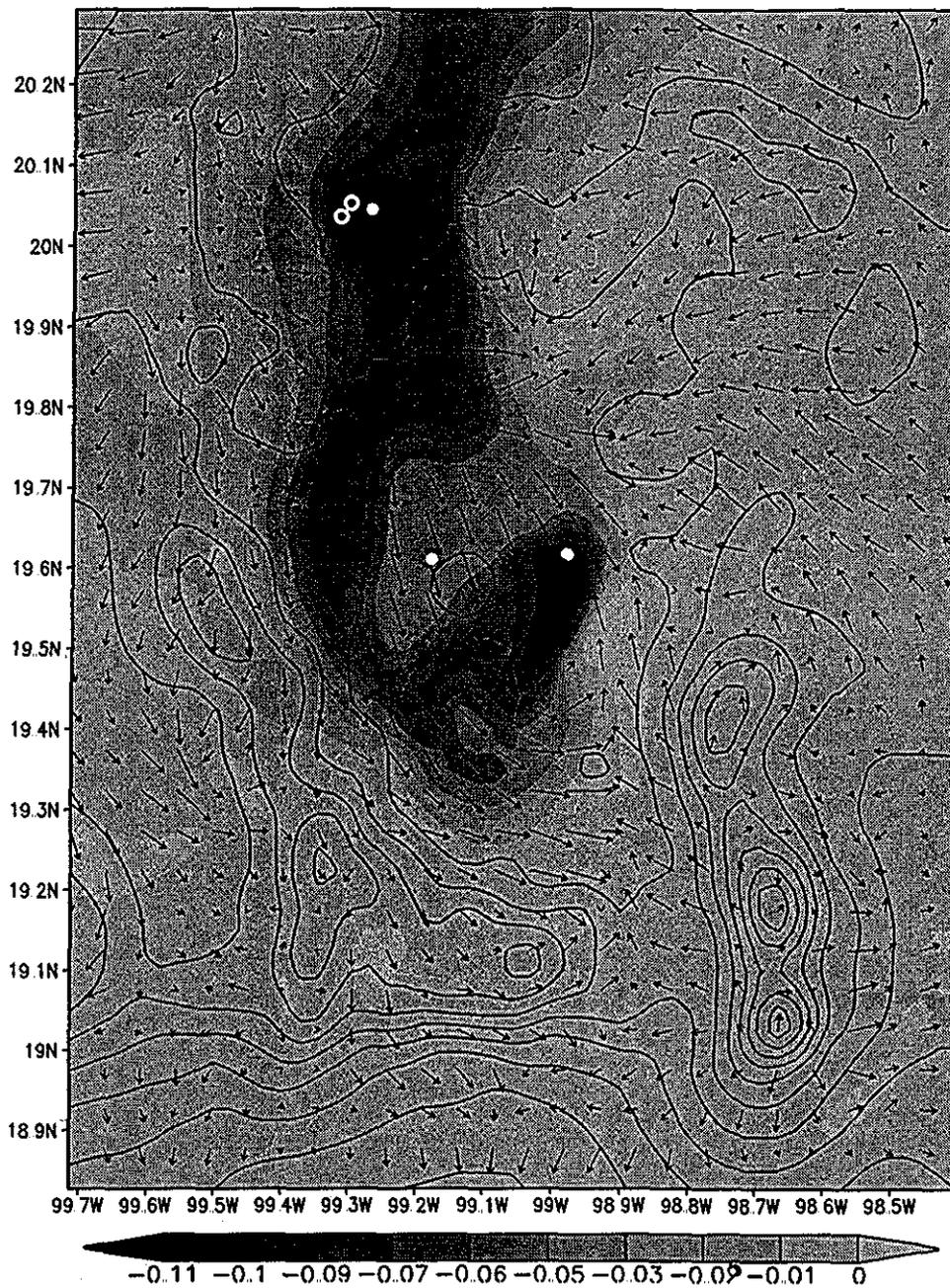


Fig. 6.10: Se muestran las diferencias entre las concentraciones superficiales de O_3 en ppm con y sin fuentes puntuales para las 20:00 LI del 4 Marzo 1997 (segundo día de modelación). Se observa como se reduce el ozono debido a la reacción entre el O_3 y el NO emitido por las fuentes puntuales.

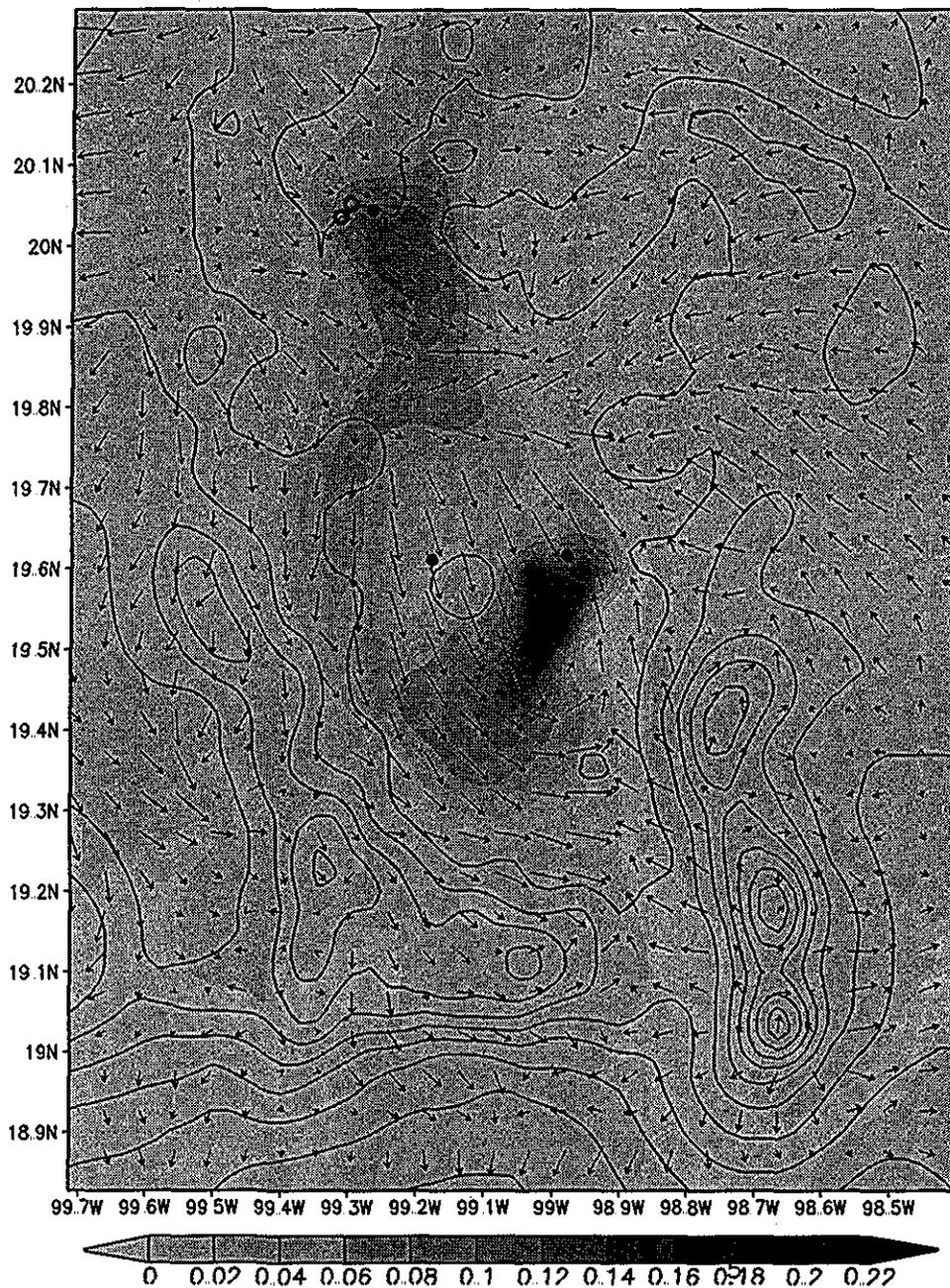


Fig. 6.11: Diferencias entre las concentraciones superficiales de NO₂ en ppm con y sin fuente puntual para las 20:00 LT del 4 Marzo 1997 (segundo día de modelación). Se observa como existe un incremento de NO₂ debido a la presencia de NO emitido por la termoeléctrica.

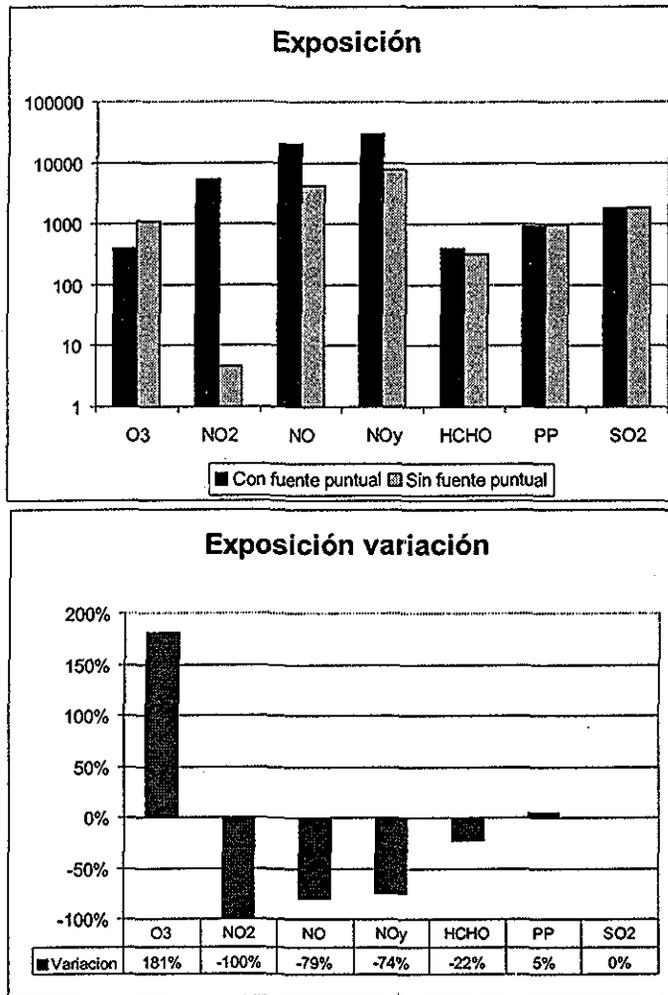


Fig. 6.12: Valores absolutos [ppm/hr] y las variaciones a la exposición al ozono [O₃], bióxido de nitrógeno [NO₂], monóxido de nitrógeno [NO], óxidos de nitrógeno reactivos [NO_y], formaldehído [HCHO], partículas potenciales [PP] y bióxido de azufre [SO₂].

Tab. 6.2: Valores de la métrica extensión [km²] para los casos con emisiones de fuentes puntuales y sin fuentes puntuales

Extensión	Con fuente	Sin fuente	Variación %
CO	0	0	0
O ₃	46713	61558	32
NO ₂	3321	18	-99
SO ₂	3111	1485	-77

Para el caso de la extensión los resultados se presentan en la Tabla 6.2 y Figura 6.13, se aprecia que la extensión del episodio de O₃, cuando se eliminan las fuentes de emisión, se incrementa en alrededor de un 32 % mientras que se tienen reducciones del 99 % y 52 % para el NO₂ y SO₂ respectivamente.

En la Tabla 6.3 y la Figura 6.14 se aprecia que la métrica de severidad para el ozono al eliminar las emisiones de las fuentes puntuales se incrementa en un 32 % mientras que el NO₂ y el SO₂ se reducen en un 99 % y 77 % respectivamente.

Tab. 6.3: Valores de la métrica severidad [ppm] para los casos con emisiones de fuentes puntuales y sin fuentes puntuales

Severidad	Con fuente	Sin fuente	Variación %
CO	0.0	0.0	0
O ₃	5403.9	7164.6	32
NO ₂	3521.7	4.0	-99
SO ₂	1350.4	306.7	-77

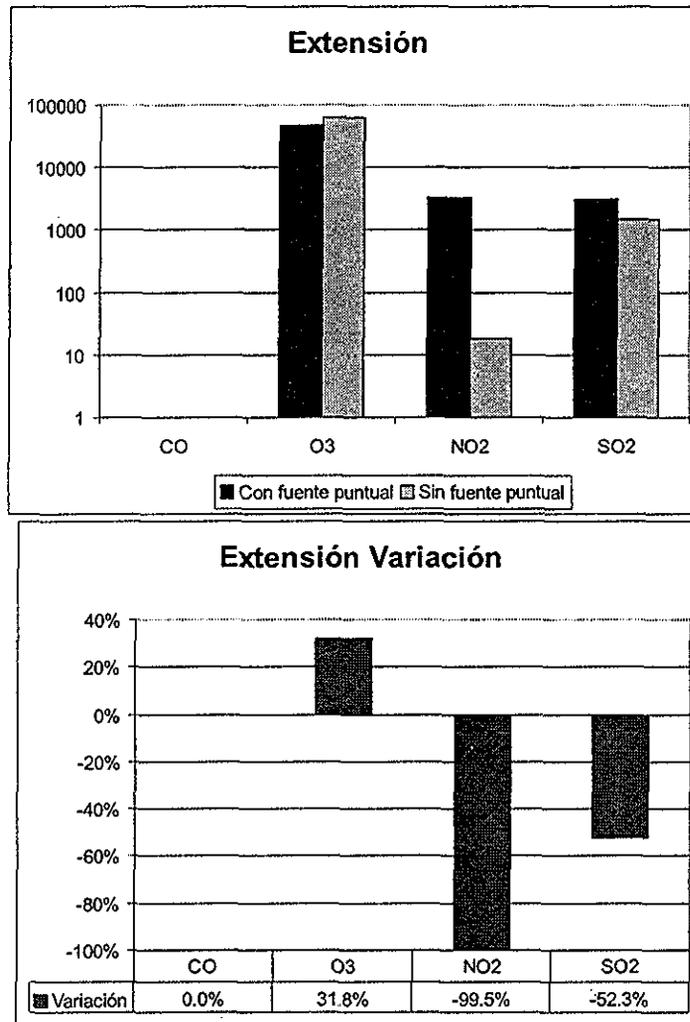


Fig. 6.13: Se muestra los valores absolutos [km²] y las variaciones a la extensión del monóxido de carbono [CO], ozono [O₃], bióxido de nitrógeno [NO₂] y bióxido de azufre [SO₂]. La escala en el eje de las *y* es logarítmica

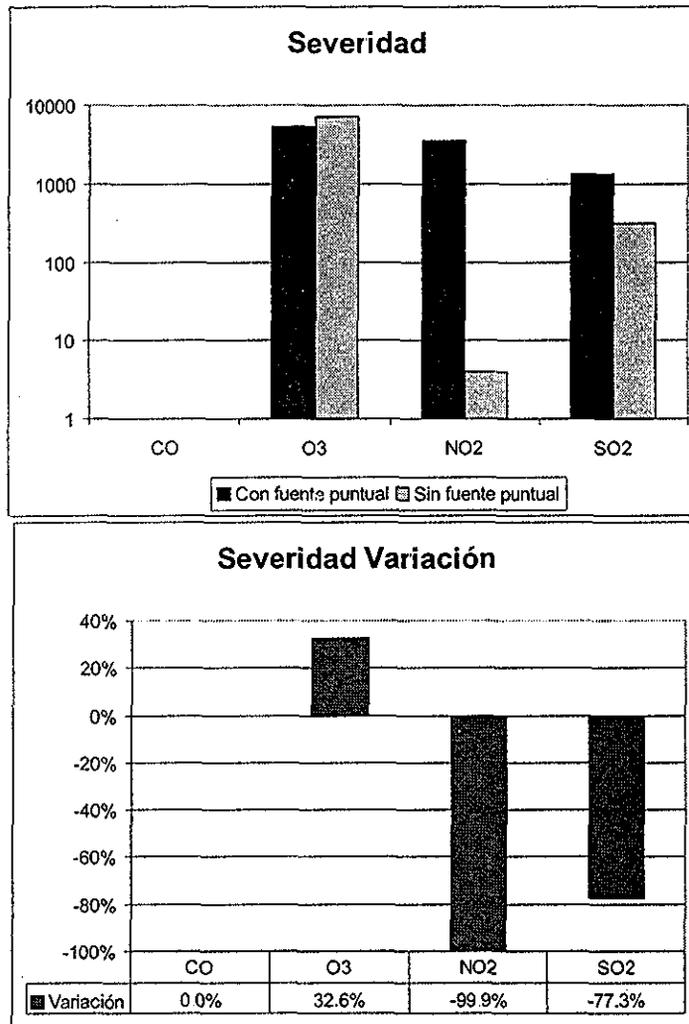


Fig. 6.14: Se muestra los valores absolutos [ppm] y las variaciones a la severidad del episodio para el monóxido de carbono [CO], ozono [O₃], bióxido de nitrógeno [NO₂] y bióxido de azufre [SO₂].

6.2.3. Conclusiones

Al disminuir de forma considerable las emisiones de las fuentes puntuales se genera un incremento importante en las concentraciones de O_3 ; así mismo existe una disminución apreciable de los óxidos de nitrógeno (NO_x) y cierta disminución en el bióxido de azufre.

Las emisiones del sector energético influyen en la calidad del aire de la ZMVM. Los contaminantes primarios emitidos por las fuentes puntuales reducen la concentración de ozono sobre la ciudad. La reducción total de las emisiones de sector energético provoca una reducción en la concentración de los compuestos de nitrógeno, pero induce un incremento en la concentración de ozono.

Si bien en este experimento se supone un caso extremo donde se reducen las emisiones a cero, un caso intermedio es el de la introducción de medidas estrictas de control de emisiones con un resultado intermedio a lo observado en este estudio. Por lo que las medidas de reducción de NO en las termoeléctricas deben acompañarse con medidas de control de emisiones de hidrocarburos.

7. CONCLUSIONES

Se generó un escenario de emisiones que puede usarse en la modelación de la calidad del aire de la región. Este escenario tiene una resolución espacial de 2 km y temporal de 1 hora. No requirió de ajustes a posteriori como la modificación en la relación hidrocarburos-óxidos de nitrógeno, como se ha requerido realizar en otros trabajos (Williams et al., 1992; Lu y Turco, 1996).

Actualmente se tiene un modelo de calidad del aire postremo capaz de reproducir la meteorología y el fenómeno de la contaminación atmosférica en la región central de la República Mexicana. Esto permite generar escenarios para probar medidas y políticas de control así como el estudio del fenómeno de la contaminación atmosférica, además de contar con una herramienta útil para la toma de decisiones.

Haciendo uso del modelo se encontró que si se regenera el Lago de Texoco el efecto de brisa tierra-agua tiende a disminuir la contaminación atmosférica, como se muestra en la Figura 6.3.

Uno de los resultados muestra que la presencia de cuerpos de agua produce descenso de la temperatura (2°C) que tienen una influencia en concentraciones de O_3 , ya que decrece la reactividad de reacciones moleculares de segundo orden, mientras que reacciones moleculares de tercer orden (reacciones de terminación de cadenas) aumentan su reactividad. Entonces, la temperaturas bajas tienden a retrasar y reducir los picos de O_3 , (Mulcahy, 1973).

Así tenemos que para el segundo día de modelación, se presenta una reducción en el máximo de O_3 de aproximadamente 7% en el punto P1 en el sur del lago, y de 20% en el punto P2 al noreste del lago como se muestra en la Figura 6.7. Para otros días con patrones de viento diferentes otras áreas son afectadas. El caso aquí presentado es típico para un día de altos niveles de concentraciones. Las áreas de reducción de contaminantes varían en tamaño y localización, pero en nuestro caso incluyen zonas densamente pobladas.

Este resultado muestra el efecto benéfico de la presencia de cuerpos de agua cerca de la región metropolitana. Este es un factor importante para la planeación de la ciudad.

Se encontró que al disminuir de forma considerable las emisiones de las fuentes puntuales de NO se genera un incremento importante en las concentraciones de O_3 ; así mismo existe una disminución apreciable de los

óxidos de nitrógeno (NO_x) y cierta disminución en el bióxido de azufre que afectan la ZMCM. Si bien este experimento es un caso extremo, muestra que las medidas de reducción de NO en plantas termoeléctricas, deben de ir acompañadas de reducciones en la emisiones de hidrocarburos.

Los resultados del modelo se pueden mejorar aplicando algunas modificaciones, en el caso del escenario de emisiones se puede agregar una nueva especiación que sea más representativa para las emisiones de la ZMVM, describir más detalladamente las emisiones vehiculares en los municipios conurbanos del Distrito Federal y especificar las emisiones de compuestos biogénicos para las especies en México. En la parte de química incluir constantes de reacción medidas para la región y en la parte de meteorología efectuar asimilación de datos para modelar con los mejores datos meteorológicos.

Este trabajo abre el paso para realizar otras investigaciones como el conocer ¿cuál es el impacto del crecimiento urbano en la calidad del aire de la región?, ¿qué consecuencias generan las políticas de control en emisiones del sector energético?, ¿cómo es el impacto de nuevas tecnologías de control de emisiones vehiculares?, ¿qué tanto es la influencia de la contaminación de la Ciudad de México en ciudades aledañas?, con la información actual saber ¿qué tan bien el modelo puede predecir la calidad del aire?, por citar algunas

APÉNDICES

A. PARÁMETROS ESTADÍSTICOS

Para evaluar cuantitativamente el desempeño del modelo se emplean un conjunto de mediciones estadísticas estándar. Estas mediciones son las siguientes: la desviación normal tanto de los valores predichos (σ_p) como de los valores medidos (σ_o) dan una idea de que tan alejados los datos se encuentran del promedio. Para n observaciones las ecuaciones son las siguientes:

$$\sigma_p = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (p_i - \bar{p})^2}{n} \right]^{1/2} \quad (\text{A.1})$$

$$\sigma_o = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (o_i - \bar{o})^2}{n} \right]^{1/2} \quad (\text{A.2})$$

Los parámetros \bar{p} y \bar{o} son los valores medios para las n observaciones

La raíz de la desviación cuadrática media (RDCM) entre los datos medidos (o) y los datos del modelo (p) para n observaciones, dan una idea del error entre ambos (valores pequeños indican un error bajo):

$$\text{RDCM} = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (o_i - p_i)^2}{n} \right]^{1/2} \quad (\text{A.3})$$

La RDCM entre las predicciones y las observaciones se puede descomponer en dos componentes específicas, la raíz de la diferencia cuadrática media sistemática (RDCM_s) que indica los errores sistemáticos y la raíz de la diferencia cuadrática media no-sistemática (RDCM_u) que corresponde a los errores aleatorios:

$$\text{RDCM}_s = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{p}_i - o_i)^2}{n} \right]^{1/2} \quad (\text{A.4})$$

$$\text{RDCM}_u = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{p}_i - p_i)^2}{n} \right]^{1/2} \quad (\text{A.5})$$

donde \hat{p}_i se obtiene a partir de o_i mediante la siguiente expresión:

$$\hat{p}_i = a + b \cdot o_i \quad (\text{A.6})$$

a y b son la ordenada al origen y la pendiente, respectivamente, asociadas con la regresión lineal de cuadrados mínimos entre predicciones p y observaciones o .

El índice de concordancia (Ic) (Willmott, 1981) indica qué tanta coincidencia existe entre las predicciones y las observaciones, y matemáticamente se define de

la siguiente forma :

$$I_c = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (p_i - o_i)^2}{\sum_{i=1}^n (|p_i - \bar{p}| + |o_i - \bar{o}|)^2} \quad (\text{A.7})$$

donde I_c es el índice de concordancia, p_i es el valor predicho por el modelo al tiempo i , o_i es el valor medido, \bar{p} y \bar{o} son los valores medios para las n observaciones.

El valor de 1 es para la concordancia perfecta y el valor de 0 indica que no tienen concordancia los valores estudiados.

El nivel de predicción del modelo se considera alto si I_c tiende a 1, $\sigma_p \approx \sigma_o$ y $RDCM \leq \sigma_o$.

A.1. Estadística Rotacional

La estadística rotacional se estima con los siguientes parámetros, la *dirección media* se obtiene de la siguiente forma:

$$\bar{C} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos \theta_i, \quad \bar{S} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \text{sen } \theta_i \quad (\text{A.8})$$

entonces

$$\bar{R} = (\bar{C}^2 + \bar{S}^2)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.9})$$

Donde \bar{C} y \bar{S} son los momentos angulares y R es la *longitud media*, por otro lado el ángulo de la dirección media (x_0) se obtiene de la siguiente forma:

$$\bar{C} = \bar{R} \cos x_0, \quad \bar{S} = \bar{R} \text{sen } x_0 \quad (\text{A.10})$$

La *varianza circular* se obtiene con la siguiente ecuación:

$$S_0 = 1 - \bar{R} \quad (\text{A.11})$$

Donde:

\bar{R} longitud media resultante.

S_0 variancia circular.

El índice de semejanza I_s da una medida de que tan similares en dirección y que tan paralelos se encuentran dos vectores y se obtiene con la siguiente ecuación:

$$I_s = \frac{1 + \cos(\alpha - \beta)}{2} \quad (\text{A.12})$$

Donde:

α — Es al ángulo del vector 1

β — Es el ángulo del vector 2 los valores de I_p van de 0 a 1 donde 1 indica que son paralelos y van en la misma dirección, 0.5 que son perpendiculares y 0 que son paralelos pero en dirección contraria.

B. FACTORES DE EMISIÓN DE FUENTES MÓVILES

Tab. B.1: Factores de emisión IUV calculados a partir de Mobil4 para 1990 (kg/km)

km/hr	Automóvil LDGV			Ligero LDGT			Medianos		
	HC	CO	NO _x	HC	CO	NO _x	HC	CO	NO _x
4	18	280	2.5	25	340	2.5	45	750	4.5
10	9	140	2	13	165	2	36	500	4
20	5	80	1.5	7	90	1.5	17	300	4
30	4.1	60	2	5.5	80	2	11	210	3.5
40	3.4	50	2.5	4.5	70	2.5	8	150	4
50	2.9	45	2.9	4	60	3	6	120	4.5
60	2.52	40	3.25	3.5	50	3.5	5	100	4.7
70	2.51	40	3.6	3	45	3.5	4	100	4.8
80	2.5	40	4	3	45	4	3.5	105	4.9
90	2.49	35	4.5	2.5	40	4.5	3	110	5

LDVG Light Duty Gasoline Vehicle, LDGI Light Duty Gasoline Truck, HDDV Heavy Duty Diesel Vehicle, Heavy Duty Gasoline Vehicle

Tab. B.2: Factores de emisión IUV calculados a partir de Mobil4 para 1990 (kg/km) (cont.)

km/hr	Micros LDGT			R100 & Pesados HDDV			Otros Buses HDGV		
	HC	CO	NO _x	HC	CO	NO _x	HC	CO	NO _x
4	28	350	2.5	14	50	33	18	150	30
10	15	170	2	12	40	28	14	100	26
20	8	100	1.5	9	20	22.5	10	60	21
30	6	80	2	6	15	19	7	40	17.5
40	5	70	2.5	5	10	17.5	6	20	16
50	4.5	60	3	4.8	7	16	4.5	15	15.5
60	4	50	3.5	4	5	16.5	4	10	15.7
70	3.5	45	3.5	3.5	5	17.5	3.5	10	16
80	3	45	4	3	5	20	3	10	18
90	2.5	40	4.5	2.5	5	24	2.5	10	22

C. ESPECIACIÓN

La especiación de las emisiones en las clases RADM (Middleton et al., 1990) se presenta en la tabla C.1. Los perfiles de emisión por fuente (Velt, 1989) se presentan en la tabla C.2.

Tab. C.1: Factores de Agregación para el mecanismo RADM^a

Clase RADM	Categoría de Emisión	Factor de Agregación	Clase RADM	Categoría de Emisión	Factor de Agregación
CH4	Metano	1.000	OLT	Alq (prim/mezcla)	0.500
EIH	Etano	1.000		Estirenos	1.000
HC3	Propano	0.519	OLI	Alquenos (interno)	1.000
	Alcanos (0.25-0.50)	0.964		Alq (Mez prim/int)	0.500
	Acetileno	0.343	IOI	Benceno, halobencenos	0.293
	Haloalcanos	0.078		Aromáticos (<2 react)	1.000
	Otros (<0.25 react)	0.404		Estireno	1.000
	Otros (0.25-0.5 react)	1.215	XYI	Aromáticos (> 2 react)	1.000
HC5	Alcanos (0.50-1.00)	0.956		Alcanos/arom mezcla	0.090
	Otros (0.50-1.00 react)	1.075	CSL	Fenoles y cresoles	1.000
HC8	Alcanos (1.00-2.00)	0.945	HCOH	Formaldehído	1.000
	Alcanos (> 2.00)	1.141	ALD	Aldehídos sup.	1.000
	Mezcla Alq/Arom	1.002	KET	Acetona	0.253
	Otros (> 1.00)	1.011		Cetonas superiores	1.000
OLI	Propeno	1.000	ORA2	Acidos orgánicos	1.000
	Alquenos (primarios)	1.000	OL2	Eteno	1.000

^a Una o más categorías contribuyen a cada clase RADM.

Tab. C.2: Perfiles de Emisión de Compuestos Orgánicos Volátiles

Hidrocarburos	Comb Res.	Emisión Refinería	Vap. Gasolina	Proc. Quím.	Solventes	Emisión Gasolina	Emisión Diesel
saturados							
1	Metano	50		13		8	4
2	Etano	2	3	4		1	0.5
3	Propano	0.5	18	1	8	0.2	
4	C4		21	25		3	
5	C5	1	22	35	15	32	7
6	C6		12	20		8	
7	C7+		10	5		15	50
insaturados							
8	Etileno	15	2	20		6.5	10.5
9	Acetileno	6	0.5	3		5.5	3
10	Propileno	1.5	0.5	8		3	3.5
11	Metilacetileno					0.3	
12	Propadieno					0.2	
13	1-Butanos				14	1.5	
14	2-Butanos		3			0.5	
15	1,3-Butadieno	1				0.5	
16	1-Pentanos	1	3	5	3	0.7	0.5
17	2-Pentanos	1	3	5	3	0.9	
18	1-Hexanos		3	5	3	0.5	0.5
19	2,3-Hexanos		3	3	3	0.5	
20	C7+ (Hid insat)		3	3	3	1.5	2
aromáticos							
21	Benceno	5	2	1	3	4	2.5
22	Tolueno	2	4	1.5	6	6	9.5
23	Xilenos	1	2	0.5	2	4	7.5
24	Etilbenceno				2		1.5
25	Estireno				10		0.3
26	1,2,4-Trimetilbenceno						2
27	1,3,5-Trimetilbenceno						0.7
28	1,2,3-Trimetilbenceno						0.5
29	Otros C9				3		2.6
30	C10+				3	5	4
31	Formaldehído	3				1	6
32	Acetaldehído	1					0.2
33	Aldehídos Sat C4	5					4
34	Aldehídos unsat C3						0.5
35	Acetona				4		2
36	Metilacetona				3		
37	Metilisobutilcetona				2		
38	Acidos Orgánicos C2						1

D. EMISIONES BIOGÉNICAS

D.1. Estimación de Emisiones

Las emisiones de isopreno debidas a los bosques dependen tanto de la temperatura como de la actividad fotosintética. Guenther et al. (1993) desarrollaron una parametrización para la emisión del isopreno (I):

$$I = I_s \cdot C_{L,I,F} \cdot C_{T,I,F} \quad (D.1)$$

donde I es la emisión de isopreno a la temperatura T , I_s es la emisión de isopreno a la temperatura normal T_s (303.15 K) y a un flujo normal ($1000 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$) de radiación útil para la actividad fotosintética (PAR). El factor $C_{L,I,F}$ es el término de corrección del flujo de radiación y $C_{T,I,F}$ el término de corrección debido a la temperatura para las emisiones de isopreno de un bosque. Todos los factores de corrección se muestran en el apéndice. Las emisiones de isopreno provenientes de fuentes agrícolas y pastizales se consideran como función de la temperatura exclusivamente (Hahn et al., 1994).

Las emisiones de monoterpenos (M), OCOVB (O) y nitrógeno (N) también se consideran funciones de la temperatura exclusivamente para todos los tipos de uso de suelo empleados:

$$M = M_s \cdot C_{T,M} \quad (D.2)$$

$$O = O_s \cdot C_{T,O} \quad (D.3)$$

$$N = N_s \cdot C_{T,N} \quad (D.4)$$

donde $C_{T,M}$, $C_{T,O}$, $C_{T,N}$ son los factores de corrección debidos a la temperatura para los monoterpenos (Simpson et al., 1995).

La emisiones a temperatura y el flujo de radiación fotosintética activa normal se dan en la Tabla D.1 (Guenther et al., 1994) para bosques caduciformes, coníferas y mixtos (Schoenemeyer et al., 1997) para agricultura y pastizales. Para Tundra, la emisión se calcula de acuerdo a las mediciones hechas cerca de la Bahía de Hudson en Canadá (Klinger et al., 1994). Para tierras húmedas costeras, sólo emisiones de isopreno se han detectado y no de monoterpenos.

Desafortunadamente, no se han realizado mediciones de OCOVB. Para bosque húmedo tropical (Zimmerman et al., 1988), se emplearon datos de

Tab. D.1: Emisiones a temperatura normal (303.15 K para isopreno, monoterpenos y OCOVB, 273.15 K para nitrógeno) a flujo normal ($1000 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$) de radiación activa fotosintética.

Clase de uso de suelo	Isopreno $\mu\text{g C m}^{-2}\text{hr}^{-1}$	Monoterpenos $\mu\text{g C m}^{-2}\text{hr}^{-1}$	OCOVB $\mu\text{g C m}^{-2}\text{hr}^{-1}$	Nitrógeno $\text{ngN m}^{-2}\text{s}^{-1}$
1 Urbano	0	0	0	0
2 Agrícola	8	20	12	9
3 Pastizal	0	20	80	0.9
4 Bosque caduciforme	4400	385	715	0.07
5 B. coníferas	780	1380	840	0.07
6 B. Mixto	5775	1001	924	0.07
7 Agua	0	0	0	0
8 Manglar	0	0	0	0
9 Desierto	0	0	0	0
10 Tundra	70	0	0	0
11 Hielo perm	0	0	0	0
12 B tropical	3100	270	0	1.78
13 Sabana	0	0	0	0

mediciones de un sitio cerca a Manaus en la región del Amazonas. También ahí no se efectuaron mediciones de OCOVB. Debido a lo anterior, las emisiones de OCOVB se consideraron como cero para la Tundra y bosque húmedo tropical hasta que más información se encuentre disponible. A partir de mediciones realizadas por Zimmerman et al. (1988) las emisiones en la sabana se consideraron como cero.

Las emisiones de nitrógeno se tomaron principalmente de Simpson et al. (1995) para bosque húmedo tropical la emisión se calcula de acuerdo a las mediciones de Kaplan et al. (1988) en un sitio cercano a Manaus. No hay datos disponibles para tundra y sabana.

Se debe considerar que los datos de emisiones biogénicas están sujetos a una considerable incertidumbre. Cada especie de planta emite compuestos en diferentes cantidades. La abundancia de un especie dada generalmente no se conoce exactamente, especialmente cuando se usa una celda de un tamaño de varios kilómetros. Por ejemplo, el mayor emisor de isopreno son los robles. En los datos de uso de suelo del modelo MM5 sólo especifica bosque caduciforme o mixto. Guenther et al. (1994) emplearon un promedio de porcentaje de robles en ese tipo de bosque en EUA para calcular su emisión. Adicionalmente, la emisión depende de la densidad de biomasa, la fracción de ramas asoleadas, etc. Simpson et al. (1995) da una exactitud de un factor de 5 a 10 para su fórmula parametrizada.

D.2. Especiación

Para poder emplearse RADM2, todas las emisiones de óxidos de nitrógeno se trataron como monóxido de nitrógeno (NO). Esta es la estimación máxima, porque la emisión del óxido nitroso (N₂O) es despreciable. En RADM2 los COV se agrupan de acuerdo a su estructura y reactividad. Las emisiones de monoterpenos y OCOVB se distribuyen en sus respectivas clases RADM2. La mayoría de los monoterpenos se pueden agrupar en la clase OLI (olefinas, Middleton et al. (1990)). El Miriceno y ocimeno se ponen en la clase ISO (isopreno) debido a su estructura similar al isopreno. P-cimeno es un compuesto aromático y se agrupa dentro de la clase XYL (xileno). Los OCOVB mayormente se agrupan de acuerdo a Middleton et al. (1990). El z-3-hexenil-acetato, que se emite en grandes cantidades por varias especies de plantas se agrupa en la clase OLI debido a su doble enlace interno.

La distribución se presenta en la Tabla D.2 que se deriva de las mediciones de König et al. (1995), Winer et al. (1983) y Martin et al. (1997). Para las categorías de uso de suelo de MM5, las emisiones de naturaleza biogénica sólo se pueden estimar en forma aproximada.

Tab. D.2: Distribución de emisiones de monoterpenos y OCOVB en las diferentes clases RADM2

Clase de uso de suelo	Mono-terpenos	OCOVB	Clase de uso de suelo	Mono-terpenos	OCOVB
2 Tierra Agrícola	0.80 OLI	0.16 HC5	4 Bosque caduciforme	0.94 OLI	0.03 HC5
	0.20 ISO	0.27 HC8		0.02 ISO	0.07 OLT
		0.05 OLT			0.51 OLI
		0.37 OLI			0.15 KET
		0.03 KET			0.18 ALD
	0.12 ALD				
3 Pastizales	0.98 OLI	0.09 HC5	6 Bosque mixto	0.15 ISO	0.07 HC5
	0.02 ISO	0.07 OLT			0.07 OLT
		0.51 OLI			0.50 OLI
		0.15 KET			0.04 HCOH
	0.18 ALD		0.14 ALD		
	0.07 HC3		0.03 KET		
5 B. Coníferas y	0.85 OLI				
12 B Tropical	1.00 OLI	—			0.03 ORA1
					0.05 ORA2

D.3. Términos de Corrección

Los términos de corrección para las emisiones de isopreno provenientes de bosque son el término de corrección para el flujo de radiación $C_{L,I,F}$, y el término de corrección de temperatura $C_{T,I,F}$ (Guenther et al., 1993):

$$C_{L,I,F} = \frac{\alpha \cdot c_{LI} \cdot PAR}{(1 + \alpha^2 \cdot PAR^2)^{1/2}} \quad (D.5)$$

con los coeficientes empíricos $\alpha = 0.0027$ y $c_{LI} = 1.066$. La radiación fotosintéticamente activa PAR tiene las unidades de $\mu \text{ mol m}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

$$C_{T,I,F} = \frac{e^{\frac{c_{T1} \cdot (T - T_s)}{R \cdot T_s \cdot T}}}{1 + e^{\frac{c_{T2} \cdot (T - T_M)}{R \cdot T_s \cdot T}}} \quad (D.6)$$

donde R es la constante universal de los gases y c_{T1} , c_{T2} y T_M son constantes empíricas con $c_{T1} = 9.5 \cdot 10^4 \text{ J mol}^{-1}$ y $T_M = 314 \text{ K}$, ($T_s = 303.15 \text{ K}$) es la temperatura normal y T es la temperatura actual en K

Las emisiones de monoterpenos y OCOV dependen sólo de la temperatura:

$$C_{T,M,F} = C_{T,O,F} = e^{\beta \cdot (T - T_s)} \quad (D.7)$$

donde T es la temperatura y T_s (203.15) es la temperatura normal. β ($= 0.09 \text{ K}^{-1}$) es un coeficiente empírico. Se asume que los OCOV poseen la misma dependencia a la temperatura como los monoterpenos (Simpson et al., 1995).

Para las emisiones de isopreno, monoterpenos y OCOV provenientes de tierras agrícolas y pastizales también se emplea la misma dependencia a la temperatura (Hahn et al., 1994):

$$C_{T,I,A} = C_{T,M,A} = C_{T,O,A} = e^{\beta \cdot (T - T_s)} \quad (D.8)$$

con $\beta_A = 0.1 \text{ K}^{-1}$ y $T_s = 303.15 \text{ K}$.

La corrección por temperatura (Simpson et al., 1995) para las emisiones de nitrógeno son:

$$C_{T,N} = e^{0.071 \text{ K}^{-1} \cdot (T_{soil})} \quad (D.9)$$

con T_{soil} derivada separadamente para tierra agrícola D.10, pastizal D.11 y bosque D.12, respectivamente:

$$T_{soil} = 0.72 \cdot (T - 273.15 \text{ K}) + 5.8 \text{ K} \quad (D.10)$$

$$T_{soil} = 0.66 \cdot (T - 273.15 \text{ K}) + 8.8 \text{ K} \quad (D.11)$$

$$T_{soil} = 0.84 \cdot (T - 273.15 \text{ K}) + 3.6 \text{ K} \quad (D.12)$$

Glosario

Abreviaturas

AGEB	Área Goestadística Básica, pág. 12.
ARO	Anillos aromáticos con tres enlaces dobles, pág. 26.
CAR	Carbonilos, pág. 26.
COV	Compuestos Orgánicos Volátiles, pág. 6.
DATGEN	Base de datos de emisiones de fuentes puntuales elaborada por el INE , pág. 10.
EPA	US Environmental Protection Agency, pág. 35.
FDDA	Four Dimension Data Assimilation.
GDF	Gobierno del Distrito Federal, pág. 7.
HDDV	Heavy Duty Diesel Vehicle, pág. 93.
HDGV	Heavy Duty Gasoline Vehicle, pág. 93.
IMADA	Investigación sobre Materia Particulada y Deterioro Atmosférico, pág. 35.
IMP	Instituto Mexicano del Petróleo, pág. 7.
INE	Instituto Nacional de Ecología, pág. 7.
INEGI	Instituto Nacional de Estadística Geografía e Informaática. Entidad federal encargada de los censos economicos, de población y vivienda.
LDGV	Light Duty Gasoline Vehicle.
LDGT	Light Duty Gasoline Truck.
LDGT	Light Duty Diesel Truck, pág. 93.
LT	Local Time. Hora local, pág. 37.

- MCCM** Multiscale Climatic Chemistry Model. Desarrollado por el Instituto Fraunhofer, Alemania, pág. 4.
- MP** Material Particulado, pág. 6.
- NCAR** National Center for Atmospheric Research, pág. 32.
- NCEP** National Center for Atmospheric Research., pág. 32.
- NOAA** National Oceanic and Atmospheric Administration, pág. 32.
- OCOVB** Otros Compuestos Orgánicos Volátiles Biogénicos, pág. 23.
- OLE** Olefinas. Alquenos, compuestos con dobles enlaces entre carbonos, pág. 26
- PAR** Parafinas alcanos y compuestos con enlaces sencillos, pág. 26
- PBL** Planetary Boundary Layer
- PM_{2,5}** Partículas menores a 2.5 micras, pág. 76.
- ppm** Partes por millón, pág. 74.
- PROAIRE** Programa para mejorar la calidad del aire ZMVM, pág. 16.
- RACM** Regional Atmospheric Chemistry Mechanism, pág. 22.
- RADM2** Rain Acid Deposition Model version 2, pág. 23.
- RAMA** Red Automática de Monitoreo Ambiental, pág. 33.
- RDCM** Raíz de la desviación cuadrática media, entre valores medidos y modelados, pág. 52.
- TOMS** Total Ozone Monitoring Satellite, pág. 23.
- UNAM** Universidad Nacional Autónoma de México, pág. 7.
- ZMCM** Zona Metropolitana de la Ciudad de México. Región que incluye la Ciudad de México y los municipios conurbanos del estado de México.
- ZMVM** Zona Metropolitana del Valle de México. Misma región de la ZMCM, pág. 3.

Compuestos químicos

CO	Monóxido de carbono, pág. 6.
HCHO	Formaldehído, pág. 78.
NO	Monóxido de nitrógeno, pág. 6.
NO₂	Dióxido de nitrógeno, pág. 6.
NO_x	Óxidos de nitrógeno que comprenden NO y NO ₂ , pág. 6.
O₃	Ozono, pág. 71.
•OH	Radical hidroxilo, pág. 16.
SO₂	Dióxido de azufre, pág. 6.

A

antropogénicas Emisiones producidas por actividades humanas, pág. 7.

B

biogénicas Emisiones producidas por seres vivos (plantas, árboles, ganado) y fenómenos naturales (erupciones volcánicas), pág. 7.

E

exposición potencial integrada de la población Cuantifica la magnitud de la exposición en tiempo y espacio, incorporando el tamaño de la población potencialmente expuesta a niveles no saludables de algún gas criterio, pág. 78.

extensión Suma los elementos de malla que durante el episodio han sobrepasado la norma de contaminación para cada gas, pág. 78.

P

postremo Actual, moderno, último en su tipo, pág. 1.

S

severidad Suma las veces que las concentraciones de un gas criterio han sobrepasado la norma ambiental, pág. 78.

Símbolos

α	Factor multiplicativo para optimizar el Ic, pág. 56.
$\overline{\theta_1'^2}$	Varianza de la temperatura potencial del agua líquida Burk-Thomson, pág. 20.
$\overline{\theta_1'^2 q_w'}$	Covarianza de la temperatura potencial del agua líquida sobre la humedad total Burk-Thomson, pág. 20.
ρ^*	Diferencia de densidades $\rho_s - \rho_t$, pág. 20.
ρ_c	Densidad de una especie química, vapor de agua, agua de lluvia o hielo, pág. 20.
ρ_0	Densidad del aire, pág. 20.
ρ	Densidad del aire, pág. 20.
$\dot{\sigma}$	Componente vertical del viento eje z , pág. 20.
σ_p	Desviación normal de los valores predichos del modelo, pág. 52.
σ_o	Desviación normal de los valores observados, pág. 52.
Ψ	Exposición. Cuantifica la magnitud de la exposición en tiempo y espacio, incorporando el tamaño de la población potencialmente expuesta a niveles no saludables de algún gas criterio, pág. 78.
$\bar{w}_{i,j,n}$	Población en la celda i, j , pág. 78.

Variables

\hat{p}_i	Valor de la predicción a partir del valor de la observación (o_i) al tiempo i , pág. 90.
$\int [\text{HO}] dt$	Concentración integrada promedio diaria del radical HO, pág. 28.
Ic	Índice de concordancia, pág. 52.
\bar{o}	Promedio de los valores observados, pág. 90.
\bar{p}	Promedio de los valores predichos del modelo, pág. 90.
$\overline{q_w'^2}$	Varianza de la humedad total Burk-Thomson, pág. 20.
a	ordenada al origen, pág. 90.

- b pendiente de la regresión lineal de cuadrados mínimos entre predicciones p y observaciones o , pág. 90.
- c^* Concentración de la norma de calidad del aire, pág. 78.
- $C_{L,I,F}$ Término de corrección del flujo de radiación, pág. 96.
- $C_{T,I,F}$ Término de corrección debido a la temperatura para las emisiones de isopreno de un bosque, pág. 96.
- $C_{T,M}$ Término de corrección debido a la temperatura para las emisiones de monoterpenos, pág. 96.
- $C_{T,N}$ Término de corrección debido a la temperatura para las emisiones de nitrógeno, pág. 96.
- $C_{T,O}$ Término de corrección debido a la temperatura para las emisiones de OCOVB, pág. 96.
- CN Concentración de carbón negro, pág. 76.
- D_{ki} Longitud del segmento k de la vialidad i , pág. 15.
- E_a Emisión anual de una fuente de área [Ton/año], pág. 14.
- E_h Emisión horaria de una fuente de área [kg/h], pág. 14.
- E_{c^*} Estensión. Suma los elementos de malla que durante el episodio han sobrepasado la norma de contaminación para cada gas, pág. 78.
- E_{hkj} Emisión en el segmento k de la vialidad i a la hora h del vehículo tipo j [kg/h], pág. 15.
- E_{nh} Emisión en la celda n a la hora h [$\text{kg}/\text{h}^{-1}\text{km}^{-2}$], pág. 15.
- F'_j Factor de emisión de vehículos tipo j en frío, pág. 15.
- f_h Fracción de vehículos en frío que circula a la hora h , pág. 15.
- F_j Factor de emisión de vehículos tipo j en caliente, pág. 15.
- I Emisión de isopreno, pág. 96.
- I_s Isopreno a la temperatura normal T_s , pág. 96.
- $k_{\text{HO Emit}}$ Constante de reacción del HO con el compuesto emitido, pág. 28.
- $k_{\text{HO Modelo}}$ Constante de reacción del HO con el compuesto en el modelo RADM2, pág. 28.

m	Factor de escala depende de la transformación de coordenadas correspondiente, pág. 20.
M	Emisiones de monoterpenos, pág. 96.
N	Emisiones de nitrógeno, pág. 96.
$N_{c^*,n}$	Número de celdas que exceden una concentración c^* , pág. 78.
n_{hij}	Número de vehículos tipo j en la vialidad i a la hora h , pág. 15.
o	Dato medido u observado contra el cual se compara el dato generado por el modelo p , pág. 90.
O	Emisiones de OCOVB, pág. 96.
p	Dato generado por el modelo, pág. 90.
p_0	Presión de referencia, pág. 20.
p_s	Presión capa en la superficie, pág. 20.
p_t	Presión capa tope superior del modelo, pág. 20.
q^2	Energía cinética turbulenta, pág. 20.
S	Severidad. Suma las veces que las concentraciones de un gas criterio han sobrepasado la norma ambiental, pág. 78.
T	Temperatura para estimación de emisión de isopreno, pág. 96.
T_s	Temperatura normal 303.15 K, pág. 96.
u	Componente horizontal del viento en el eje x , pág. 20.
v	Componente horizontal del viento en el eje y , pág. 20.
\bar{w}_{max}	Población máxima en la región de estudio, pág. 78.
RDCM_s	Raíz de la desviación sistemática cuadrática media, entre valores medidos y modelados.
RDCM_u	Raíz de la desviación no sistemática cuadrática media, entre valores medidos y modelados.
RO₂	Radical peroxi, pág. 28.

REFERENCIAS

- ACIJ, SMA, y INE: 2000, *Almanaque de Datos y Tendencias de la Calidad del Aire en Ciudades Mexicanas. Compendio 2000*. México D F: Agencia de Cooperación Internacional del Japón; Secretaría de Medio Ambiente, Recursos Naturales y Pesca; Instituto Nacional de Ecología; Centro Nacional de Investigación y Capacitación Ambiental
- Atkinson, R. y A. C. Lloyd: 1984, 'Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of ozone with organic compounds under atmospheric conditions'. *Chem. Rev* 84, 437-470
- Atkinson, R., A. C. Lloyd, y L. Wings: 1982, 'An updated chemical mechanism for hydrocarbons/ NO_x / SO_2 photooxidations suitable for inclusion in atmospheric simulation models'. *Atmos Environ.* 16, 1341-1355
- Burk, S y W. Thompson: 1989, 'A vertically nested regional numerical weather prediction model with second order closure physics'. *Mon. Wea Rev.* 117, 2305-2324.
- Calvert, J. G. y S. Madronich: 1987, 'Theoretical study of the initial products of the atmospheric oxidation of hydrocarbons'. *J. Geophys. Res* 92, 2211-2220.
- Calvert, J. G. y W. R. Stockwell: 1984, 'Mechanism and rates of the gas phase oxidations of sulfur dioxide and nitrogen oxides in the atmosphere'. In: J. G. Calvert (ed): *SO_2 , NO and NO_2 Oxidation Mechanisms: Atmospheric Considerations* Butterworth, Mass, pp. 1-62
- CAM: 2001, 'Inventario de Emisiones Zona Metropolitana del Valle de México 1998 (Preliminar)' CD ROM media, Comisión Ambiental Metropolitana.
- Carter, W. P. I.: 1990, 'A detailed mechanism for gas-phase atmospheric reaction of organic compounds'. *Atmos Environ.* 24A, 481.
- Castro, I., I. G. Ruiz-Suárez, M. Montero, M. Molina, y J. C. Ruiz-Suárez: 1997, 'Sensitivity analysis of a radiation transfer model and experimental photolysis rates of NO_2 in the atmosphere of Mexico City'. *Atmos. Environ.* 31
- Cavaliere, L. y L. Bertotti: 1997, 'Effect of reduced diffusion on surface wind and wave fields'. *Mon. Wea Rev.* 125, 3024-3029.
- Chang, J. S., R. A. Brost, I. S. A. Isaken, S. Madronich, P. Middleton, W. R. Stockwell y C. J. Walcek: 1987, 'A three-dimensional Eulerian acid deposition model: physical concepts and formulation'. *J. Geophys. Res* 92, 14681-14700
- DDF Dirección del Medio Ambiente: 1995, 'Programa para mejorar la calidad del aire'.
- DDF, DGPCC, RAMA, y SIE: 1995, *Inventario de fuentes de área (precursores de ozono y monóxido de carbono para la zona metropolitana de la ciudad de México 1995)* DDF-Subdirección de Inventario de Emisiones

- DDF, subdirección del ambiente y fuentes vehiculares: 1995, *El control de la contaminación ambiental en el área metropolitana de la Ciudad de México, fase II - Resultados del programa a corto plazo*. Informe técnico. Departamento del Distrito Federal (DDF).
- DDF y SMA: 2000, *Compendio estadístico de la Calidad del Aire 2000*. Gobierno del Distrito Federal, Secretaría del Medio Ambiente
- Demerjian, K L., J. A. Kerr, y J G Calvert: 1974, 'The mechanism of photochemical smog formation' *Adv Environ. Sci. Tech.* 4, 1-262.
- DeMore, W., A. P. Sander, M. J. Molina, D M Golden, R F Hampson, M. J. Kurylo, C J Howard, y A. R. Ravishankara: 1988, 'Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling, Evaluation Number 8'. Technical Report, NASA, Jet Propulsion Lab, California Institute of Technology, Pasadena.
- Dirección General de Prevención y Control de la Contaminación: 1999, *Compendio Estadístico de la Calidad del Aire 1986-1999*. 109 pp. Gobierno del Distrito Federal.
- Dodge, M C.: 1977, 'Combined use of modeling techniques and smog chamber data to derive ozone-precursor relationships'. Technical Report, U.S. Environ Prot Agency, Research Triangle Park, N C Re EPA-600/3-77-001a, pp 881-889
- Dudhia, J.: 1993, 'A nonhydrostatic version of the Penn State/NCAR mesoscale model: validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front'. *Mon. Wea Rev* 121, 1493-1513
- EPA: 1991, 'Supplement A to Compilation of Air Pollutant Emission Factors Volume II: Mobile Sources' Technical Report, U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards
- EPA Office of Mobile Sources, Emissions Inventory Group, Assessment and Modeling Division: 1998, 'MOBILE4 Vehicle Emission Modeling Software' Página web <http://www.epa.gov/otaq/m5.htm>
- Erisman, J. W., A. van Pul, y P. Wyers: 1994, 'Parametrization of surface resistance for the quantification of atmospheric deposition of acidifying pollutants and ozone'. *Atmos. Env.* 28, 2595-2607
- Flassak, T., C. Kessler, y N. Mossiopoulos (Eds.): 1992, 'Development of EURAD zooming model and first preparations for the joint EUMAC dry case simulations; In: Photooxydants: Precursors and Products'. Garmisch-Partenkirchen, Germany: EROTRAC Symposium 1992, SPB Academic Publishing by Den Haag
- Fuentes, V., A. Jazcilevich, R. Aguirre, A. Wellens, J. Aysa, y C. Rivera: 1993, 'Modelo Metropolitano de Gestión de la Calidad del Aire'. Reporte Técnico, Dirección de Ecología, DDF. Informe Final.
- García-Reynoso, J A : 1997, 'Evaluación preliminar del impacto de una fuente puntual en los niveles de ozono en el Valle de México'. Tesis de Maestría, DEPI-UNAM 001-01177-G2-1997 82 pp
- Georgopoulos, P. G. y S. Arunachalam: 1997, 'Alternative metrics for assessing the relative effectiveness of NO_x and VOC emission reductions in controlling ground-level ozone'. *J Air Waste Management Assoc* 47, 383-850
- Gery, M W., G Z. Whitten, y J. P. K. M. C. Dodge: 1989, 'A photochemical mechanism for urban and regional scale computer modeling'. *Int. J. Chem Kinet.* 94, 12925-12956.

- Grell, G. A., J. Dudhia, y D. R. Stauffer: 1994, 'A description of the fifth-generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5)'. Technical Report, NCAR. Tech Note TN-398+SRT.
- Guenther, A. B., P. R. Zimmerman, P. C. Harley, R. K. Monson, y R. Fall: 1993, 'Isoprene and monoterpene emission rate variability: Model evaluations and sensitivity analyses'. *J. Geophys. Res.* 98D, 12609–12617.
- Guenther, A. B., P. R. Zimmerman, y M. Wildermuth: 1994, 'Natural volatile organic compound emission rate estimates for U.S. woodlands landscapes'. *Atmos. Environ.* 19, 1–8.
- Hahn, J., J. Steinbrecher, y R. Steinbrecher: 1994, 'Studie F: Emission von Nicht-Methan-Kohlenwasserstoffen aus der Landwirtschaft. In: Enquete-Kommission'. Studienprogramm band 1 landwirtschaft, Schutz der Erdatmosphäre des Deutschen Bundestages (Hgrs.), teilband 1, Economica Verlag, Bonn.
- Hamba, F.: 1993, 'A modified K model for chemically reactive species in the planetary boundary layer'. *J. Geophys. Res.* 98D, 5173–5182.
- INEGI: 2000, *Censo Estadístico de Población y Vivienda 2000*. Instituto Nacional de Estadística, Geografía e Informática. <http://inegi.gob.mx>
- Jazcilevich, A. y V. Fuentes-Gea: 1974, 'The random choice method in the numerical solution of the atmospheric transport equation'. *Env. Soft.* 9, 23–31.
- Joseph, J. H., W. J. Wiscombe, y J. A. Weinman: 1976, 'The Delta-Eddington approximation for radiative flux transfer'. *J. Atmos. Sci.* 33, 2452–2459.
- Kalnay, E., M. Kanamitsu, R. Kistler, W. Collins, D. Deaven, L. Gandin, M. Iredell, S. Saha, G. White, J. Woollen, Y. Zhu, M. Chelliah, W. Ebisuzaki, W. Higgins, J. Janowiak, K. C. Mo, C. Ropelewski, J. Wang, A. Leetmaa, R. Reynolds, R. Jenne, y D. Joseph: 1996, 'The NCEP/NCAR 40-year reanalysis project'. *Bull. Amer. Meteor. Soc.* 77(3), 437–471.
- Kaplan, W. A., S. C. Wofsy, M. Keller, y J. M. da Costa: 1988, 'Emission of NO and deposition of O₃ in a tropical forest system'. *J. Geophys. Res.* 93D, 1389–1395.
- Kerr, J. A. y J. G. Calvert: 1982, 'Chemical transformation modules for eulerian acid deposition models, vol. I., The gas phase chemistry'. Rep. EPA-600-3-85-015, U.S. Environ. Prot. Agency Washington, D.C. Available as NTIS PB85-173714-XAB for Nat. Tech. Inf. Ser., Springfield, Va.
- Killus, J. P. y G. Z. Whitten: 1982, 'A new carbon-bond mechanism for air quality modeling'. Technical Report, U.S. Environ. Prot. Agency D.C. Rep. EPA-600-3-82-041.
- Klemp, J. y D. Durran: 1983, 'An upper boundary condition permitting internal gravity wave radiation in numerical mesoscale models'. *Mon. Wea. Rev.* 111, 430–444.
- Klemp, J. y R. Wilhelmson: 1978, 'The simulation of three-dimensional convective storm dynamics'. *J. Atmos. Sci.* 35, 1270–1096.
- Klinger, L. F., R. Zimmerman, J. P. Greenberg, L. E. Heidt, y A. B. Guether: 1994, 'Carbon trace gas fluxes along a successional gradient in the Hudson Bay lowland'. *J. Geophys. Res.* 99D, 1469–1494.
- König, G., M. Brunda, H. Puxbaum, C. N. Hewitt, S. C. Duckham, y J. Rudolph: 1995, 'Relative contribution of oxygenated hydrocarbons to the total biogenic VOC emissions of selected mid-European agricultural and natural plant species'. *Atmos. Environ.* 129, 861–874.

- Lamb, B., A. Geunther, D. Gay, y H. Westberg: 1987, 'A national inventory of biogenic hydrocarbons emissions'. *Atmos Environ* 21, 461-464.
- Leone, J. A. y J. H. Seinfeld: 1985, 'Comparative Analysis of chemical reacting mechanism for photochemical smog'. *Atmos Environ* 19, 437-464.
- Lu, R., R. P. Turco: 1996, 'Modeling three-dimensional ozone distributions over the Los Angeles Basin'. *Atmos Environ* 30, 4155-4176.
- Luna, E.: 1997, 'Simulación del clima termal y la calidad del aire del Valle de México, usando un modelo meteorológico no-hidrostático'. Tesis de Maestría, DEPEI-UNAM 001-01177-L2-1997. 116 p.
- Madronich, S.: 1987, 'Photodissociation in the atmosphere, 1. Actinic flux and the effects of ground reflections and clouds'. *J. Geophys. Res* 92, 9740-9752.
- Martín, R. S., I. Villanueva, J. Zhang, y C. J. Popp: 1997, 'Biogenic emissions of nonmethane hydrocarbons, monocarboxylic acids and low molecular weight carbonyl compounds from vegetation in central New Mexico'. *Air & Waste Management Association's 90th Annual meeting & Exhibition*. Toronto, Ontario, Canada. Paper 97-RP139.07.
- Martínez, I.: 1999, 'Seguridad Lago Nabor Carrillo'. Comunicación personal.
- Middleton, P.: 1987, 'Analysis of emissions database for regional models'. *Atmos Environ* 21, 1497-1509.
- Middleton, P., W. Stockwell, y W. P. I. Carter: 1990, 'Aggregation and analysis of volatile organic compound emissions for regional modeling'. *Atmos Environ* 24A, 1107-1133.
- Morris, R., C. Emery, N. Lolk, y G. Yarwood: 1991, *Sensitivity of the urban airshed model to meteorological inputs when applied to the New York metropolitan region using ROM-UAM interface Tropospheric Ozone*. Ed. Vostal J.J. Air Waste Management Assoc.
- Mossiopoulos, N. (Ed.): 1992, 'Simulations of the wind flow in the valley of Mexico, EUROTRAC, The EUMAC Zooming Mode'. EUROTRAC Symposium, SPB Academic Publishing by Den Haag.
- Mulcahy, M.: 1973, *Gas Kinetics*. Thomas Nelson and Sons, E.U.I. I.D.
- NASA-Goddard Space Flight Center Scientific Visualization Studio: 1999, 'LandSat Thematic Mapper data for Mexico City'. pagin http://svs.gsfc.nasa.gov/stories/LandSat/mexico_city.html
- Niki, H., E. E. Daby, y B. Weinstock: 1972, 'Mechanism of smog reactions'. *Adv. Chem. Ser.* 113, 16-57.
- Penner, J. E. y J. J. Watson: 1982, 'Air quality model update'. Rep UCID-19300, Lawrence Livermore Lab. Univ. of Calif., Livermore.
- Peralta Rosales, O. A.: 2001, 'Determinación de carbón negro de monóxido de carbono en la Ciudad de México'. Tesis de Maestría 001-03060-P2-2001-1, Centro de Ciencias de la Atmósfera-UNAM. 108 pp.
- Perkey, D. J. y C. W. Kreitzberg: 1976, 'A time-dependent lateral boundary scheme for limited area primitive equation models'. *Mon. Wea. Rev.* 104, 744-755.
- Ruggaber, A., R. Dlugi, R. Forkel, W. Seidl, H. Hass, T. Nakajima, B. Vogel, y M. Hammer: 1995, 'Modelling of radiation quantities and photolysis frequencies in the troposphere'. En: A. Ebel y N. Moussiopoulos (eds.): *Air Pollution III: Observations and Simulations of Air Pollution: Results From SANA and EUMAC (EUROTRAC)*, Vol. 4. Southampton, pp. 111-119.

- Ruggaber, A., R. Dlugi, y I. Nakajima: 1994, 'Modelling of radiation quantities and photolysis frequencies in the troposphere'. *J. Atmos. Chem.* **18**, 171–210
- Ruiz Suárez, J., L. Ruiz-Suárez, C. Gay, I. Castro, M. Montero, S. Eidels-Dubovoi, y A. Muhila: 1993a, 'Photolytic rates for NO₂, O₃ and HCOH in the atmosphere of Mexico City'. *Atmos. Env.* **27A**, 427.
- Ruiz-Suárez, L., I. Castro, B. Mar., M. E. Ruiz-Santoyo, y X. Cruz: 1993b, 'Do we need and ad hoc chemical mechanism for Mexico City photochemical smog?'. *Atmos. Env.* **27A**, 405.
- Ruiz-Suárez, L. G.: 1989, 'The photo-oxidation of hydrocarbons in Mexico City. Effects of Altitude Part I'. *Atmosfera* **2**, 47
- Schere, K. L. y K. I. Demerjian: 1984, 'User's Guide for the Photochemical Box Model'. Technical Report, U.S. Environ. Prot. Agency, Research Triangle Park, N. C.
- Schoenemeyer, I., K. Richter, y G. Smiatek: 1997, 'Vorstudie über ein räumlich und zeitlich aufgelöstes Kataster antropogener und biogener Emissionen für Bayern mit Entwicklung Landesamt für Umweltschutz'. Technical Report, Fraunhofer-Institut für Atmosphärische Umweltforschung, Garmisch-Partenkirchen
- Seidl, W.: 1998, 'The Biogenic Emission Module'. Technical Report, Fraunhofer-Institut für Atmosphärische Umweltforschung, Garmisch-Partenkirchen
- SEMARNAP, Subsecretaria de Recursos Naturales, Unidad del Inventario Nacional de Recursos Naturales: 1994, 'Inventario Nacional Forestal 2000'. sitio: <http://www.semarnap.gob.mx/ssrn/inventario/inventar.htm>
- Simpson, D., A. Guenther, C. Hewitt, y R. Steinbrecher: 1995, 'Biogenic Emissions in Europe. 1 Estimates and uncertainties'. *J. Geophys. Res.* **100D**, 22875–22890.
- Sistla, G., N. Zhou, W. Hao, J. Ku, S. Rao, R. Borestein, F. Freedman, y P. Ithunis: 1996, 'Effects of uncertainties in meteorological inputs on urban airshed model predictions and ozone control strategies'. *Atm. Env.* **30**(12), 2011–2026.
- Smirnova, I. G., J. M. Brown, y S. G. Benjamin: 1997, 'Performance of different sol model configurations in simulating ground temperature and surface fluxes'. *Mon. Wea. Rev.* **120**, 1870–1884.
- Smirnova, I. G., J. M. Brown, S. G., and Kim, D.: 2000, 'Parameterization of cold-season processes in the MAPS land-surface scheme'. *J. Geophys. Res.-Atmospheres* **105**(D3), 4077–4086
- Smolarkiewicz, P. y W. W. Grabowski: 1990, 'The multidimensional positive definite advection transport algorithm: nonoscillatory option'. *J. Comp. Phys.* **86**, 355–375.
- Stauffer, D. R. y N. L. Seaman: 1994, 'Multiscale four-dimensional data assimilation'. *J. Appl. Met.* **33**, 416–434
- Stockwell, W. R.: 1986, 'A homogeneous gas phase mechanism for use in a regional acid deposition model'. *Atmos. Environ.* **20**, 1615–1632
- Stockwell, W., F. Kirchner, y M. Kuhn: 1997, 'A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling'. *J. Geophys. Res.* **102**, 25,847–25,879
- Stockwell, W., P. Middleton, J. S. Chang, y X. Tang: 1995, 'The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling'. *J. Geophys. Res.* **95**, 16343–16367.

- Su, F., J. G. Calvert, y J. H. Shaw: 1980, 'A FT-IR spectroscopy study of ozone-ethene reaction mechanism in O₂-rich mixtures' *J Phys. Chem.* **84**, 239-246.
- Velt, C.: 1989, 'Emissions of SO_x, NO_x, VOC and CO from east european countries'. *Atmos. Environ.* **23A**(12), 2683-2700.
- Wesley, M. L.: 1989, 'Parametrization of surface resistance to gaseous dry deposition in regional numerical models'. *Atmos. Environ.* **16**, 1293-1304.
- Whitten, G. Z., H. Hogo, y J. P. Killus: 1980, 'The carbon-bond mechanism: A condensed mechanism for photochemical smog'. *Environ. Sci Technol* **18**, 280-287.
- Whitten, G. Z., J. P. Killus, y R. G. Johnson: 1985, 'Modeling of auto exhaust for smog chamber data for EKMA development'. *Rep. CDWA1A/01-1130 (FY-85)*, contract 68-02-3735, U. S. Environ. Prot. Agency, San Rafael Calif.
- Williams, M. D., G. Sosa, G. E. Stritt, X. Cruz, A. G. Russel, y L. A. McNair: 1992, 'Development and testing of an Air Quality Model for Mexico City' Technical Report, Los Alamos National Laboratory. LA-UR-92-808. 192 pp.
- Willmott, C. J.: 1981, 'On the validation of models'. *Phys. Geography* **2**, 184-194.
- Willmott, C. J., S. Acklerson, R. E. Davis, J. J. Feddema, K. M. Klink, D. R. Legates, J. O'Donnell, y C. M. Rowe: 1985, 'Statistics for the evaluation and comparison of models'. *J Geophys. Res.* **90**, 8995-9005.
- Winer, A. M., D. R. Fitz, R. Atkinson, D. E. Brown, W. P. L. Carter, M. C. Dodd, C. W. Johnson, M. A. Myers, K. R. Neisess, M. P. Poe, y E. R. Stephens: 1983, 'Investigation of the Role on Natural Hydrocarbons in Photochemical Smog Formation in California'. Final Report, California Air Resources Board, Statewide Air Pollution Research Center, University of California, Riverside, California 92521. Contract No. AO-056-32.
- Zimmerman, P. R., J. P. Greenberg, y C. E. Westberg: 1988, 'Measurement of Atmospheric Hydrocarbons and Biogenic Fluxes on the Amazon Boundary Layer'. *J Geophys. Res.* **93D**, 1407-1416.
- Zou, X., Y. H. Kuo, y Y. R. Guo: 1995, 'Assimilation of atmospheric radio refractivity using a nonhydrostatic adjoint model'. *Mon. Wea. Rev.* **123**, 2229-2249.

ÍNDICE ALFABÉTICO

— Símbolos —

α , 56
 σ_o , 52, 90
 σ_p , 52, 90
 RAMA, 33

— A —

ácido

fórmico, 29
 H_2SO_4 , 27
 HNO_3 , 27
 nítrico, 78
 sulfúrico, 78

alcanos, 25

PAR, 26

aldehídos, 25, 28

altura geopotencial, 32

anidamiento

estrategia, 34

ArcInfo, 12

aromáticos, 25

ARO, 26

— B —

benzaldehído, 29

Burk-Thompson, 55

— C —

carbón negro (CN), 76

carbonilos

CAR, 26

cetonas, 28

CO, 79

transporte, 61

Compuestos Orgánicos Volátiles, 6, 27

perfiles de emisión, 94

cobertura vegetal, 9

Criegee, 28

Cuernavaca, 3

— D —

DAIGEN, 10

dirección media, 91

dominios, 34

— E —

emisiones

antropogénicas, 7

área, 7

lineales, 7

puntuales, 7

biogénicas, 7, 9

clasificación, 7

factores de emisión, 93

fuentes de área, 12

fuentes móviles, 14

fuentes puntuales, 10

monoterpenos, 96

OCOVB, 96

enlace, 26

EPA, 35

escenario de emisiones

características, 6

compuestos, 6

resolución espacial, 8

resolución temporal, 8

especiación, 94

fuentes móviles, 16

especies sustitutas, 25

estado

Hidalgo, 10

México, 7, 10

evaluación, 31

— F —

factores de emisión, 93

flujo

lago, 70

montaña-valle, 37

formaldehído, 78

— G —

GDF, 7, 12, 16

- I —
 IMADA, 35
 IMP, 7, 66
 índice de concordancia I_c , 52, 68, 90
 índice de semejanza, 91
 INE, 7, 10
 INEGI, 31
 inventario de emisiones
 biogénicas, 9
 método, 7
 inversiones térmicas, 31
 isopreno, 23
 Iztaccíhuatl, 31
- L —
 lago, 67, 70, 74
 longitud media resultante, 91
 Los Alamos, 66
- M —
 Manaus, 97
 MCCM, 4, 6, 7, 67
 mecanismo
 fase acuosa, 25
 fase gas, 25
 métrica
 exposición, 78
 extensión, 78
 severidad, 78
 MM5, 4, 97
 Mobile4, 16
 momentos angulares, 91
 monoterpenos, 23, 96
 monóxido de carbono, 6
 MP, 6
- N —
 NCAR, 32
 NCEP, 32
 nitrógeno, 96
 NOAA, 32
- O —
 ozono, 62, 76
 OCOVB, 23, 96, 98
 olefinas, 25
 OLE, 26
 óxidos de azufre
 reacciones, 27
 SO_2 , 6, 12, 76
 óxidos de nitrógeno
 emisiones de suelos, 23
 NO, 6, 76
 NO_2 , 6, 12, 76
 NO_x , 6, 76
 pérdida de, 27
 reacciones, 27
 ozono, 25
- P —
 parámetros estadísticos
 R , 91
 I_c , 90
 I_s , 91
 \bar{C} , 91
 \bar{S} , 91
 \hat{p} , 90
 RDCM, 90
 $RDCM_s$, 90
 $RDCM_u$, 90
 σ_o , 90
 σ_p , 90
 S_0 , 91
 peróxido
 hidrógeno, 27
 orgánico, 27
 $PM_{2.5}$, 78
 Popocatepetl, 31
 presión
 niveles, 32
 presión reducida, 32
 PROAIRE, 16
 Puebla, 10, 34
- Q —
 Querétaro, 10
- R —
 RACM, 22
 radial, 51
 radical
 hidroxi, 27
 RO_2 , 28
 NO_3 , 27
 peroxi, 27, 30
 TCO_3 , 29
 RADM2, 4, 22, 26, 98
 clases, 16, 23, 94
 ALD, 28
 CSL, 29
 DCB, 29

- GLY, 29
- HC5, 28
- HC8, 28
- HCHO, 28
- ISO, 29
- KEI, 28
- MGLY, 29
- OL2, 29
- OLI, 29
- OLT, 29
- TOL, 29
- XYL, 29
- factores de agregación, 94
- RAMA, 50, 54, 56, 68
 - estaciones, 33
- RDCM, 52, 90
 - no sistemático, 52, 90
 - sistemático, 52, 90
- reactividad pesada, 27
- refinería, 76
- rotacional, 91
- S —
- sector energético, 75
- sierra
 - Ajusco, 31
 - Chichinautzin, 31
 - Cruces, 31
 - Guadalupe, 31
 - Nevada, 31
- T —
- temperatura, 32
- temperatura superficial del mar, 32
- termoeléctrica, 76
- Texcoco, 5, 67
- Ilaxcala, 10
- Toluca, 3, 34
- tubulencia
 - convectiva, 55
- turbulencia
 - mecánica, 55
- turbulencia, 54
- U —
- UNAM, 7
 - Centro de Ciencias de la Atmósfera, 3
 - Facultad de Ingeniería, 3
 - Instituto de Geografía, 9
- unidad petroquímica, 76
- UNIX, 24
- uso de suelo, 96
- V —
- variables meteorológicas
 - altura geopotencial, 32
 - componente meridional *v*, 32
 - componente zonal *u*, 32
 - presión reducida, 32
 - temperatura, 32
 - temperatura superficial del mar, 32
- varianza circular, 91
- viento
 - componente meridional *v*, 32
 - componente zonal *u*, 32
 - dirección, 51
 - magnitud, 50
- Z —
- ZMVM, 3, 31, 34, 68