

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA**

**“OPTIMIZACIÓN DEL INVENTARIO DE EMISIONES PARA EL  
PRONÓSTICO DE LA CALIDAD DEL AIRE EN LA ZONA METROPOLITANA  
DE LA CIUDAD DE MÉXICO”**

**TESIS**

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

**INGENIERO QUÍMICO**

PRESENTA:

**HERNÁNDEZ RIVERA JOSÉ OCTAVIANO**

**DIRECTOR DE TESIS: DR. JOSÉ AGUSTÍN GARCÍA REYNOSO**

**MÉXICO, D.F.**

**NOVIEMBRE DE 2006**



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.

## **AGRADECIMIENTOS**

Al Doctor José Agustín García Reynoso, por su valiosa asesoría en la realización de esta investigación y por su amabilidad.

Al apoyo recibido del proyecto PAPIIT IN-109405

## **DEDICATORIA**

A mi familia, por el amor y apoyo que me ha dado a lo largo de mi vida

A mis amigos

A México

A Dios

## ÍNDICE GENERAL

	Página
<b>RESUMEN.....</b>	<b>1</b>
<b>INTRODUCCIÓN .....</b>	<b>2</b>
<b>JUSTIFICACIÓN.....</b>	<b>3</b>
META .....	3
OBJETIVOS.....	3
<b>CAPÍTULO 1 GENERALIDADES.....</b>	<b>4</b>
ATMÓSFERA .....	4
<i>La troposfera</i> .....	5
<i>Química de la troposfera</i> .....	5
<i>La capa límite</i> .....	5
CONTAMINACIÓN.....	6
<i>Emisiones contaminantes</i> .....	7
<i>Fuentes de contaminación del aire</i> .....	8
TRANSPORTE ATMOSFÉRICO Y DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES .....	8
INVERSIONES DE TEMPERATURA .....	9
PRINCIPALES CONTAMINANTES DEL AIRE .....	10
<i>Monóxido de carbono</i> .....	10
<i>Ozono</i> .....	10
<i>Bióxido de azufre</i> .....	11
<i>Óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>)</i> .....	12
<i>Monóxido de nitrógeno</i> .....	13
<i>Bióxido de nitrógeno</i> .....	13
<i>Hidrocarburos</i> .....	14
<i>Partículas</i> .....	14
ESMOG FOTOQUÍMICO.....	17
<b>CAPÍTULO 2 DESCRIPCIÓN DEL MODELO.....</b>	<b>20</b>
PROCESADORES .....	21
<i>TERRAIN</i> .....	21
<i>REGRID</i> .....	21
<i>RAWINS/LITTLE_R</i> .....	22
<i>INTERPF</i> .....	22
<i>INITCHEM</i> .....	22
<i>MCCM</i> .....	22
<i>NESTDOWN</i> .....	23
INVENTARIO DE EMISIONES .....	24
<i>Resolución espacial y temporal del escenario</i> .....	24
<i>Emisiones Biogénicas</i> .....	24
<i>Emisiones Antropogénicas</i> .....	25
<b>CAPÍTULO 3 METODOLOGÍA .....</b>	<b>26</b>
MODELACIÓN INVERSA .....	26
CORRECCIÓN METEOROLÓGICA .....	27
MÉTRICAS ESTADÍSTICAS .....	27

<b>CAPÍTULO 4 RESULTADOS.....</b>	<b>31</b>
DESEMPEÑO DE LA MODELACIÓN METEOROLÓGICA DEL MODELO .....	31
<i>Corrección al campo de vientos</i> .....	31
<i>Desempeño de los parámetros meteorológicos</i> .....	33
<i>Análisis estadísticos de la meteorología del día 16 de Abril de 2006.</i> .....	35
DESEMPEÑO DEL MODELO MCCM UTILIZANDO EL INVENTARIO DE EMISIONES ORIGINAL. ....	37
<i>Análisis estadístico del desempeño de la modelación de ozono para todas las estaciones utilizando el inventario de emisiones original.</i> .....	39
<i>Concentraciones máximas obtenidas al utilizar el inventario de emisiones original</i> .....	40
MODELACIÓN INVERSA .....	42
<i>Tendencia evolutiva de la modelación inversa para ozono</i> .....	43
RESULTADOS DEL MODELO MCCM UTILIZANDO EL INVENTARIO DE EMISIONES OPTIMIZADO. ....	46
<i>Análisis estadístico del desempeño de la modelación de ozono de todas las estaciones utilizando el inventario de emisiones optimizado</i> .....	48
<i>Concentraciones máximas obtenidas al utilizar el inventario de emisiones optimizado</i> .....	49
EVALUACIÓN DEL INVENTARIO DE EMISIONES OPTIMIZADO .....	52
<i>Evaluación del desempeño de Ozono en la estación Plateros</i> .....	52
<i>Evaluación del desempeño de monóxido de carbono en la estación Tlalnepantla</i> .....	53
<i>Evaluación del desempeño de los óxidos de nitrógeno en la estación Pedregal</i> .....	55
<i>Evaluación del desempeño de NO<sub>2</sub> en la estación Lagunilla</i> .....	56
<i>Evaluación del desempeño de SO<sub>2</sub> en la estación Iztapalapa</i> .....	57
<i>Evaluación del desempeño de PM<sub>10</sub> en la estación Acatlán</i> .....	59
PROMEDIOS DE LAS MÉTRICAS ESTADÍSTICAS: IC, NGE Y NB.....	60
COMPARACIÓN DEL DESEMPEÑO DEL MODELO AL UTILIZAR AMBOS INVENTARIOS DE EMISIONES (ORIGINAL Y OPTIMIZADO) PARA LOS MESES DE ABRIL Y MAYO DE 2006 .....	62
ANÁLISIS DE RESULTADOS .....	65
<b>CAPÍTULO 5 CONCLUSIONES.....</b>	<b>66</b>
<b>RECOMENDACIONES .....</b>	<b>68</b>
<b>APÉNDICE A ESTACIONES DE MONITOREO DE LA RED AUTOMÁTICA DE MONITOREO ATMOSFÉRICO .....</b>	<b>69</b>
<b>APÉNDICE B ESQUEMAS REPRESENTATIVOS DEL MCCM Y DEL PROCESO DE LA MODELACIÓN INVERSA.....</b>	<b>70</b>
<b>APÉNDICE C COMISIÓN AMBIENTAL METROPOLITANA .....</b>	<b>71</b>
<b>APÉNDICE D PROGRAMA PARA MEJORAR LA CALIDAD DEL AIRE EN LA ZONA METROPOLITANA DEL VALLE DE MÉXICO (PROAIRE 2002-2010) .....</b>	<b>73</b>
<b>GLOSARIO .....</b>	<b>76</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA .....</b>	<b>77</b>

## ÍNDICE DE FIGURAS

	Página
<b>Fig. 1</b> Las capas de la atmósfera.....	4
<b>Fig. 2</b> Producción de ozono, fuente: RAMA. ....	18
<b>Fig. 3</b> Corrección al campo de vientos para la estación Acatlán.....	31
<b>Fig. 4</b> Corrección al campo de vientos para la estación Tacaba.....	32
<b>Fig. 5</b> Gráficas horarias de temperatura. ....	33
<b>Fig. 6</b> Gráficas horarias de velocidad de viento (corregido). ....	34
<b>Fig. 7</b> Gráficas horarias de dirección de viento.....	34
<b>Fig. 8</b> Gráficas horarias de modelación con inventario de emisiones original. ....	37
<b>Fig. 9</b> Concentraciones máximas alcanzadas por el modelo al utilizar el inventario de emisiones original.....	41
<b>Fig. 10</b> Representación evolutiva de la modelación inversa de ozono.....	44
<b>Fig. 11</b> Desempeño del modelo al utilizar el inventario de emisiones optimizado.....	46
<b>Fig. 12</b> Concentraciones máximas alcanzadas por el modelo al utilizar el inventario de emisiones optimizado. ....	50
<b>Fig. 13</b> Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo de ozono en la estación Plateros.....	52
<b>Fig. 14</b> Diagramas de dispersión de los resultados de ozono en la estación Plateros, correlacionados con las mediciones de la RAMA. ....	52
<b>Fig. 15</b> Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo para monóxido de carbono en la estación Tlalnepantla.....	53
<b>Fig. 16</b> Diagramas de dispersión de los resultados de CO en la estación Tlalnepantla, correlacionados con las mediciones de la RAMA. ....	54
<b>Fig. 17</b> Gráfica horaria comparativa del desempeño de NO <sub>x</sub> en la estación Pedregal. ....	55
<b>Fig. 18</b> Diagramas de dispersión de los resultados de NO <sub>x</sub> en la estación Pedregal, correlacionados con las mediciones de la RAMA. ....	55
<b>Fig. 19</b> Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo para NO <sub>2</sub> en la estación Lagunilla. .56	56
<b>Fig. 20</b> Diagramas de dispersión de los resultados de NO <sub>2</sub> en la estación Lagunilla, correlacionados con las mediciones de la RAMA. ....	56
<b>Fig. 21</b> Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo para SO <sub>2</sub> en la estación Iztapalapa. .57	57
<b>Fig. 22</b> Diagramas de dispersión de los resultados de SO <sub>2</sub> en la estación Iztapalapa, correlacionados con las mediciones de la RAMA. ....	58
<b>Fig. 23</b> Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo para PM <sub>10</sub> en la estación Acatlán.....	59
<b>Fig. 24</b> Diagramas de dispersión de los resultados de PM <sub>10</sub> en la estación Acatlán, correlacionados con las mediciones de la RAMA. ....	59
<b>Fig. 25</b> Promedios de los índices de concordancia para CO de los meses Abril y Mayo.....	62
<b>Fig. 26</b> Promedios de los índices de concordancia para Ozono de los meses Abril y Mayo. ....	62
<b>Fig. 27</b> Promedios de los índices de concordancia para NO <sub>x</sub> de los meses Abril y Mayo. ....	63
<b>Fig. 28</b> Promedios de los índices de concordancia para SO <sub>2</sub> de los meses Abril y Mayo.....	63
<b>Fig. 29</b> Promedios de los índices de concordancia para NO <sub>2</sub> de los meses Abril y Mayo. ....	64
<b>Fig. 30</b> Promedios de los índices de concordancia para PM10 de los meses Abril y Mayo. ....	64

## ÍNDICE DE TABLAS

	Página
<b>Tabla 1</b> Normas Oficiales Mexicanas de la evaluación de la calidad del aire.....	16
<b>Tabla 2</b> Análisis estadísticos de la corrección al campo de vientos en la estación Acatlán.....	32
<b>Tabla 3</b> Análisis estadísticos de la corrección al campo de vientos en la estación Tacuba .....	33
<b>Tabla 4</b> Análisis estadísticos de la modelación de la temperatura.....	35
<b>Tabla 5</b> Análisis estadísticos de la modelación de la velocidad de viento .....	35
<b>Tabla 6</b> Análisis estadísticos de la modelación de dirección de viento .....	36
<b>Tabla 7</b> Promedios de las métricas estadísticas de los datos meteorológicos del día 16 de Abril de 2006 .....	36
<b>Tabla 8</b> Análisis estadístico del desempeño del modelo utilizando el inventario de emisiones original .....	38
<b>Tabla 9</b> Análisis estadísticos del desempeño de la modelación de ozono al utilizar el inventario de emisiones original .....	39
<b>Tabla 10</b> Promedios de los índices de concordancia y de las métricas de error craso normalizado y tendencia de error, del desempeño del modelo utilizando el inventario de emisiones original.....	39
<b>Tabla 11</b> Promedios de las evaluaciones de picos de todo el horario de modelación.....	41
<b>Tabla 12</b> Concentraciones máximas alcanzadas de todo el horario de modelación y los valores de TPPA y PPA.....	41
<b>Tabla 13</b> Especies de hidrocarburos que fueron modificadas en el inventario de emisiones .....	42
<b>Tabla 14</b> Factores finales del ajuste de las emisiones de los hidrocarburos .....	45
<b>Tabla 15</b> Análisis estadístico de las modelaciones utilizando el inventario de emisiones optimizado .....	47
<b>Tabla 16</b> Análisis estadístico del desempeño de la modelación de ozono al utilizar el inventario de emisiones optimizado.....	48
<b>Tabla 17</b> Promedios de las evaluaciones de los picos para el horario de modelación .....	50
<b>Tabla 18</b> Valores máximos alcanzados y la evaluación de los picos .....	50
<b>Tabla 19</b> Promedios de los índices de concordancia y las métricas del error craso normalizado y tendencia del error normalizado del desempeño del modelo al utilizar el inventario de emisiones optimizado .....	51
<b>Tabla 20</b> Análisis estadístico de las modelaciones de ozono en la estación Plateros .....	53
<b>Tabla 21</b> Análisis estadístico de las modelaciones de monóxido de carbono en la estación Tlalnepantla .....	54
<b>Tabla 22</b> Análisis estadístico de las modelaciones de NO <sub>x</sub> en la estación Pedregal. ....	55
<b>Tabla 23</b> Análisis estadístico de las modelaciones de NO <sub>2</sub> en la estación Lagunilla.....	57
<b>Tabla 24</b> Análisis estadístico de las modelaciones de SO <sub>2</sub> en la estación Iztapalapa .....	58
<b>Tabla 25</b> Análisis estadístico de las modelaciones de PM <sub>10</sub> en la estación Acatlán .....	59
<b>Tabla 26</b> Comparación de los promedios de los índices de concordancia .....	60
<b>Tabla 27</b> Comparación de los promedios del error craso normalizado .....	61
<b>Tabla 28</b> Comparación de los promedios de Nb .....	61
<b>Tabla 29</b> Comparación de los promedios de los picos de todo el horario de la métrica TPPA.....	61
<b>Tabla 30</b> Comparación de los promedios de los picos de todo el horario de la métrica PPA .....	61



## RESUMEN

Se optimizó el inventario de emisiones que es utilizado para pronóstico de la calidad del aire en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México. Este inventario se emplea como insumo del modelo *Multiscale Climate Chemistry Model (MCCM)*. La optimización se realizó mediante la técnica de modelación inversa, que consiste en la obtención de emisiones de contaminantes a partir de mediciones ambientales.

En esta investigación se elaboraron las herramientas para la evaluación del desempeño del modelo, se identificaron las métricas estadísticas que permitieran una apreciación objetiva de los resultados y además se realizaron las representaciones gráficas a fin de tener una rápida comparación visual cualitativa de los datos.

Con este nuevo inventario de emisiones el modelo ofrece un mejor pronóstico de los contaminantes criterio destacando entre ellos el ozono. Además se mejoró la exactitud de la predicción de los picos de las concentraciones contaminantes.

## INTRODUCCIÓN

La Zona Metropolitana del Valle de México es una de las áreas más pobladas del mundo, ya que en esta zona residen 17.6 millones de habitantes equivalente al 17% de la población nacional (INEGI, 2000). En el Valle de México existe un gran problema de contaminación, en esta zona del país se genera alrededor del 30% del producto interno bruto correspondiente a labores comerciales e industriales, además existe un parque vehicular de aproximadamente 3 millones de vehículos. El consumo diario promedio de combustibles en la Zona Metropolitana del Valle de México para el año 2004 (GDF, 2004) se estimó en 306 mil barriles equivalentes de gasolina; es decir 48.6 millones de litros por día. El sector transporte requirió del 53.7% de la energía suministrada a la Zona Metropolitana del Valle de México, siendo la gasolina el principal combustible utilizado; siguiendo el sector industrial que consumió el 34% del suministro, teniendo al gas natural como el principal energético en la demanda del sector; y el sector residencial y de servicios consumieron el 12.4%, siendo el gas LP el que cubrió la mayor parte de la demanda. Estas actividades económicas, industriales y vehiculares son las responsables que se generen grandes emisiones contaminantes. Cabe señalar que el problema de la contaminación atmosférica no es un problema local, sino que afecta otras regiones.

En el Valle de México es indispensable contar con un sistema que pronostique los niveles de contaminación para reducir la exposición de la población a altos niveles de contaminación atmosférica y para prevenir o disminuir las contingencias ambientales atmosféricas.

El presente trabajo consta de cinco capítulos. El primer capítulo presenta las generalidades fisicoquímicas de la atmósfera, se detallan las fuentes contaminantes, y se enumeraron los principales contaminantes criterio del aire. En el Capítulo 2 se realizó la descripción del modelo, de cada una de sus partes procesadoras y se puntualiza la estructura del inventario de emisiones. En el Capítulo 3 se detalla la metodología de la modelación inversa seguido del proceso que se llevó a cabo para la corrección meteorológica y se describen las métricas estadísticas utilizadas para las evaluaciones del desempeño del modelo. En el Capítulo 4 se reportan los resultados y se presentan también el análisis de los mismos. El Capítulo 5 expone las conclusiones del proyecto, además hay un apartado donde se expresan las recomendaciones y se anexan 4 apéndices.

## JUSTIFICACIÓN

En la Zona Metropolitana de la Ciudad de México se sobrepasa la norma de calidad del aire por ozono más del 60% de los días del año (2004, fuente: RAMA). Cuando las concentraciones alcanzan concentraciones dañinas a la población en general se declara por las autoridades competentes una contingencia ambiental.

Las medidas de control y protección se empiezan a aplicar una vez declarada la contingencia, y tienen efecto una vez que la población ya ha sido expuesta a los altos niveles de contaminación. Por lo que es necesario contar con un sistema capaz de predecir niveles de concentraciones de los gases criterio (ozono, óxidos de nitrógeno, bióxido de azufre, monóxido de carbono, PM<sub>10</sub>) para aplicar las medidas de control anticipadamente, y así evitar o aminorar las contingencias y para alertar a la población con antelación, o bien, para informar cotidianamente cuales serán las áreas metropolitanas con altos niveles de contaminación, aunque no se generen contingencias.

Actualmente el Centro de Ciencias de la Atmósfera de la UNAM tiene una gran experiencia en el manejo y aplicaciones tanto en el modelo meteorológico Mesoscale Model (MM5) (donde se cuenta con un sistema de predicción del tiempo meteorológico UNAM-CCA 2004), como el modelo de calidad del aire MCCM asociado al MM5. Gracias a esto, se tiene la capacidad para implementar un modelo computacional capaz de predecir los niveles de nube fotoquímica con resolución espacial de 4 Km. y con 24, 36 y 48 horas de anticipación el cual depende del inventario de emisiones. Es necesario contar con un inventario de emisiones que permita obtener un pronóstico fiable.

Considerando lo anterior, en el presente trabajo se proponen los siguientes puntos:

### Meta

Obtener un inventario de emisiones que permita una mejor predicción de la calidad del aire de la Zona Metropolitana del Valle de México, mediante la optimización del ya existente.

### Objetivos

- Crear programas computacionales para el rápido manejo, visualización y evaluación de los resultados.
- Evaluar el desempeño actual del modelo.
- Determinar los ajustes pertinentes al inventario de emisiones, para así:
- Modelar de manera inversa a fin de mejorar el inventario de emisiones.
- Evaluar el desempeño del modelo al utilizar el inventario de emisiones optimizado.
- Plantear recomendaciones para el mejoramiento del pronóstico de la calidad del aire.

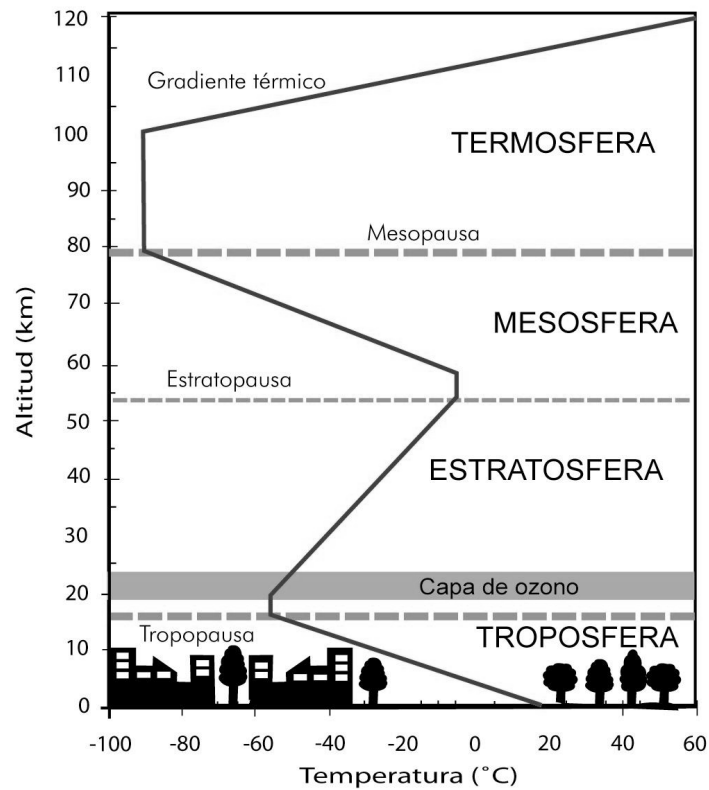
## CAPÍTULO 1

### GENERALIDADES

#### Atmósfera

Se denomina atmósfera a la mezcla de gases que envuelven la tierra. Los gases fundamentales que forman la atmósfera son: nitrógeno (79%), oxígeno (21%), argón (0.934%) y bióxido de carbono (0.033%). Otros gases de interés presentes en la atmósfera son el vapor de agua, el ozono y diferentes óxidos. (Colín 2001)

Al no tratarse de un sistema homogéneo, la atmósfera puede subdividirse en diferentes capas, como es representado en la Figura 1. Dicha subdivisión se hace generalmente en función del gradiente de temperatura de las mismas.



**Fig. 1** Las capas de la atmósfera.

La atmósfera consta de cuatro capas principales denominadas troposfera, estratosfera, mesosfera y termosfera, además de una extensa capa de transición entre las diferentes regiones con el nombre de tropopausa, estratopausa y mesopausa. Su localización, sin embargo, no es siempre fija, sino que varía principalmente con la latitud y la estación del año.

### ***La troposfera***

La extensión de la troposfera viene definida por el perfil de temperatura observado en la parte más baja de la atmósfera. De hecho, se observa que la temperatura disminuye con la altitud durante los primeros 10 a 18 Km., después de lo cual aumenta de nuevo. Al punto de mínima temperatura se le conoce como tropopausa, de forma que la troposfera pueda definirse como parte de la atmósfera comprendida entre la tropopausa y la superficie terrestre.

La importancia de la troposfera radica en que gran parte de la vida se desarrolla en el seno de la misma, además que contiene prácticamente la totalidad del agua y representa el 90% de la masa total de la atmósfera.

### ***Química de la troposfera***

La troposfera es un medio oxidante cuya química viene determinada por las reacciones del ozono y los radicales OH y NO<sub>3</sub>.

El radical hidroxilo (OH) se genera durante el día debido a la fotólisis del ozono troposférico.

El radical OH gobierna los procesos de oxidación en cadena de la mayoría de los compuestos orgánicos volátiles (COV's) emitidos en la troposfera. El ozono en la troposfera también es un importante oxidante, especialmente para compuestos insaturados como los terpenos.

Toda la complejidad química de la troposfera puede resumirse en dos fenómenos clave de consecuencias dañinas a la biosfera: el smog fotoquímico y la lluvia ácida.

### ***La capa límite***

Los veloces vientos reinantes en la troposfera son moderados en su parte más baja a causa de la fricción con la superficie terrestre, dando lugar como resultado a una capa parcialmente estática de aproximadamente 1 km de profundidad, llamada capa límite.

Además de los gases presentes en la parte más alta de la troposfera, la capa límite contiene gran cantidad de partículas sólidas en suspensión (PM<sub>10</sub> y PM<sub>2.5</sub>), además de cientos de compuestos de origen antropogénico que pueden encontrarse en concentraciones localmente muy elevadas. Sus concentraciones vienen determinadas por el balance que se establece entre la emisión, su transformación química y la pérdida por transferencia a la troposfera libre.

La química de esta delgada capa viene determinada principalmente por fenómenos meteorológicos como la temperatura, la intensidad lumínica y el contenido de agua presente en forma de vapor o niebla.

### **Contaminación**

En México la Ley General del Equilibrio Ecológico y Protección al Ambiente menciona que:

“Se entiende por contaminación la presencia en el ambiente de uno o más contaminantes o de cualquier combinación de ellos que cause desequilibrio ecológico”

En ese sentido, podemos definir la contaminación del aire como la presencia en el aire de sustancias que alteran la calidad del mismo e implica riesgo, daño o molestia grave a los seres vivos y bienes en general.

Es importante señalar que la Zona Metropolitana del Valle de México sufre de contaminación fotoquímica debido a una serie de factores de tipos fisiográficos y meteorológicos. Como lo son (GDF, 2004):

- El entorno montañoso. La Zona del Valle de México se encuentra a una altura de 2,240 metros sobre el nivel del mar, esta rodeada por una cadena montañosa formada por las sierras del Ajusco, Chichinautzin, Nevada, Las cruces, Guadalupe y Santa Catarina, esta cadena montañosa impide una adecuada dispersión de los contaminantes, propiciando el estancamiento.
- Las frecuentes inversiones térmicas que ocurren en el valle, en más del 70% de los días del año, son un fenómeno natural que causa un estancamiento temporal de las masas de aire en la atmósfera, con ello se inhibe la capacidad de autodepuración y se favorece la acumulación de los contaminantes.
- Los sistemas anticiclónicos que se registran frecuentemente en la región centro del país, tienen la capacidad de generar cápsulas de aire inmóvil en áreas que pueden abarcar regiones mucho mayores que el Valle de México.
- Otro de los factores importantes es que el Valle de México recibe una radiación solar intensa y constante a lo largo de todo el año que acelera la formación fotoquímica de los contaminantes atmosféricos como el ozono. Ello es el resultado de las complejas reacciones que la luz ultravioleta del sol desencadena entre los óxidos de nitrógeno y los hidrocarburos emitidos a la atmósfera.
- Debido a la altura de la Ciudad de México el aire tiene un contenido de O<sub>2</sub> aproximadamente 23% menor con relación al aire de la zona a nivel del mar, con esto los sistemas de combustión son menos eficientes y emiten una cantidad mayor de contaminantes.

- El viento de la zona metropolitana tiene como entrada principal la zona norte, región donde el terreno es plano.

Todos estos factores que afectan la calidad del aire de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México, hacen que el problema sea prioridad de estudio para la proposición de mecanismos de prevención y control de la contaminación.

Cabe mencionar que algunos factores que contribuyen a una alta concentración de contaminantes no se pueden manejar, o no pueden ser manipulados para obtener una disminución de la contaminación. Entre estos factores se encuentran los procesos meteorológicos, las condiciones geográficas, las emisiones biogénicas, estabilidad de la atmósfera, problemas de inversión térmica, etc.

Hay otros factores que pueden ser manipulados para mejorar la calidad del aire. Una medida que se ha aplicado para resolver parte de este problema es la disminución de las emisiones contaminantes de fuentes móviles y estacionarias, al operar el programa hoy no circula pretende que los automovilistas utilicen menos su automóvil y hagan uso del transporte público y no contaminen. Otro factor que se puede manipular y que es de mayor importancia es aumentar la calidad de los combustibles, para que de esta manera haya una mejor combustión (aumentando el octanaje de las gasolinas) y disminuyendo las trazas de azufre en el combustible diesel, para la reducción de las emisiones de SO<sub>2</sub>. También la utilización de los convertidores catalíticos ayuda a disminuir las emisiones contaminantes.

Actualmente en el Valle de México se encuentran operando programas de mejoramiento de la calidad del aire como lo es el Programa para mejorar la calidad del aire en la Zona Metropolitana del Valle de México (PROAIRE).

### ***Emisiones contaminantes***

Según el origen los contaminantes estos se clasifican en:

*Biogénicos.* Se deben a procesos en los cuales no interviene el hombre, por ejemplo: erupciones, incendios, producción de gases en pantanos, transporte de polen por el viento, etc.

*Antropogénicos.* Se deben a los procesos propios de la actividad humana.

También los contaminantes se clasifican en primarios y secundarios, los contaminantes primarios son los que son emitidos a la atmósfera desde su fuente, y los contaminantes secundarios son formados en el seno de la atmósfera misma a través de procesos químicos o fotoquímicos que sufren los contaminantes primarios. La importancia de los contaminantes secundarios se pone en manifiesto en que son los causantes de la contaminación fotoquímica, la lluvia ácida y la disminución de la capa de ozono.

### ***Fuentes de contaminación del aire***

*Fuentes puntuales.* Generan grandes cantidades de contaminantes siendo estas áreas pequeñas. Por ejemplo industrias farmacéuticas, químicas, vidrieras, cementeras, plantas generadoras de energía, fundidoras, etc.

*Fuentes lineales.* Son ocasionadas por las emisiones de los vehículos en las vialidades.

*Fuentes de área.* Estas son emisiones que no se pueden localizar en un punto en específico y que abarca una amplia distribución. No pertenece a ninguna de las clasificaciones anteriores.

### **Transporte atmosférico y dispersión de contaminantes**

La calidad del aire local está influida por la velocidad de la mezcla de contaminantes que son emitidos a la atmósfera. En general, las bajas velocidades del viento tienen como resultado altas concentraciones de contaminantes, si existe una adecuada velocidad de viento habrá transporte y dilución de contaminantes.

La velocidad del viento en el nivel del suelo tiende a disminuir durante la noche y a elevarse durante la mañana, especialmente si no hay nubes, pero las emisiones también tienden a disminuir durante la noche debido a las pocas actividades contaminantes durante este periodo. De esta forma los niveles de contaminación más altos se dan durante la mañana cuando las emisiones crecen rápidamente antes que la velocidad del viento aumente y las condiciones de dispersión mejoren. (Figueruelo, 2001)

Además de la dirección del viento, el grado de mezcla vertical en la atmósfera también afecta a las concentraciones de contaminantes. La rugosidad de la tierra produce cierta cantidad de turbulencia en la capa más baja (capa límite) de la atmósfera, así activa la mezcla y la dispersión de contaminantes. Este efecto se incrementa con la magnitud de la rugosidad de la superficie y es mayor en una ciudad con edificios muy elevados que en un área lisa con pocas obstrucciones.

Otro fenómeno que beneficia la dispersión de contaminantes es el gradiente de temperatura termal. La presión atmosférica disminuye exponencialmente con la altura. El aire ascendente se expande a medida que la presión disminuye y al expandirse se enfría. Con ello se logra una inestabilidad en la atmósfera lo cual permite un transporte vertical de los contaminantes y con ello su dispersión.

Los complicados movimientos del aire a lo largo de la superficie terrestre son factores cruciales en la dispersión de fenómenos de contaminación del aire. Si cesan los movimientos del aire, puede aumentar localmente la concentración de los contaminantes. Normalmente la temperatura de la troposfera disminuye con la altura. Hay circunstancias en las que se puede invertir esta situación a determinada altura. Esto es una inversión de temperatura, que agrava fuertemente el problema de la contaminación por atrapar los contaminantes y no permitir una libre dispersión.



### **Inversiones de temperatura**

Las inversiones de temperatura son debidas a diversas procedencias. La inversión por subsidencia se forma en la vecindad de un área de altas presiones. El aire frío de las capas altas comienza a descender para ocupar el sitio del aire superficial que tiende a desplazarse a la zona de baja presión. El aire, que va descendiendo se comprime debido al aumento de presión, calentándose y atrapando de bajo aire más frío. Puede permanecer como una capa templada a alturas de varios cientos de metros de la superficie.

La inversión de temperatura también ocurre cuando existe inversión por irradiación. Este fenómeno se da cuando hay noches claras y sin nubes. La superficie se enfría rápidamente, irradiando su calor a la atmósfera y enfriando más el aire contiguo a la superficie que el situado a alturas superiores, produciéndose la inversión de temperatura. El efecto es que las emisiones en el nivel del suelo son atrapadas en la capa de inversión estable, la cual no tendrá, más de 100 a 200m de altura. Al día siguiente la capa de inversión se desgasta gradualmente por efecto del calentamiento producido por el sol hasta que, hacia media mañana el perfil de temperatura ha vuelto a aquel de condiciones neutras.

En el Valle de México es común que haya inversiones de temperatura producidas por las características topográficas del terreno, ya que las montañas que rodean la Cuenca de México funcionan como muro de contención del aire contaminado. Cuando las paredes del valle se enfrían durante la noche, el aire adyacente también se enfría y cae al valle, mientras que el aire más templado puede fluir sobre las cimas del valle, dejando atrapado abajo el aire frío y cualquier agente contaminante. En los días fríos y secos, generalmente en invierno, son más frecuentes estos fenómenos.

Una dinámica atmosférica estable actúa como tapadera que no permite la difusión de contaminantes, con ello se aumenta las posibilidades de mayores reacciones entre contaminantes primarios, dando lugar a productos aun más nocivos.

## Principales contaminantes del aire

### *Monóxido de carbono*

Es un gas incoloro, inodoro, insípido y tóxico. Es más ligero que el aire y tiene alta difusividad. El monóxido de carbono es producto de la combustión incompleta de material que contiene carbono y de algunos procesos industriales y biológicos. Un proceso de combustión que produce CO en lugar de CO<sub>2</sub> resulta cuando la cantidad de oxígeno requerida es insuficiente, y depende de la temperatura de flama, tiempo de residencia en la cámara de combustión y turbulencia en la misma.

Estos parámetros se tienen mejor controlados en fuentes estacionarias de combustión que en vehículos automotores. Por ésta razón, aproximadamente el 70 % de las emisiones de CO provienen de fuentes móviles. Las concentraciones horarias de CO a menudo reflejan patrones de tráfico vehicular.

La permanencia media de las moléculas de CO en la atmósfera, es de un mes aproximadamente, antes de oxidarse y convertirse en CO<sub>2</sub>.

Entre los efectos que provoca el CO se encuentra la disminución de la capacidad de concentración y del rendimiento intelectual, como disminución del transporte de O<sub>2</sub> en la corriente sanguínea. El CO compite con el O<sub>2</sub> por los sitios activos de la hemoglobina y, una vez adherido el monóxido de carbono, es retenido 200 veces más fuerte que el O<sub>2</sub>. Además se sabe que bajo estas circunstancias el poco oxígeno que llega a adsorberse es más difícil desprender en presencia del monóxido, por lo que se limita aun más la oxigenación celular.

Unas cuantas partes por millón bloquean del 1% al 2% de la hemoglobina, 30 ppm durante 8 a 12 horas afectan el 5%. En agentes de tránsito no fumadores se ha encontrado que tienen desactivada entre 0.8 y 1.5% de la hemoglobina en tanto que agentes fumadores el porcentaje asciende hasta 3.9%. En general con una disminución del aporte de oxígeno al organismo el corazón aumenta su actividad, y se disminuyen la agudeza visual y la visión nocturna.

La OMS (Organización Mundial de Salud) recomienda como límite para preservar la salud pública una concentración de 9 ppm (ó 10,000 µg/m<sup>3</sup>) promedio de 8 horas 1 vez al año. La Norma Oficial Mexicana de CO (NOM-021-SSA-1993) establece como límite de protección a la salud, una concentración de 11 ppm (ó 12,595 µg/m<sup>3</sup>) promedio de 8 horas, la cual puede rebasarse 1 vez al año, como medida de protección a la salud de la población susceptible.

### *Ozono*

Es un gas azulado de olor picante, alótropo del oxígeno, poco denso y de fuerte poder oxidante. Tiene olor semejante al del cloro que muchas personas detectan a partir de 0.02

ppm. El ozono se produce en forma natural durante las tormentas eléctricas por el paso de descargas a través de la atmósfera, que se encuentra en la estratosfera en la llamada capa de ozono.

El ozono es un contaminante secundario formado por una compleja serie de reacciones químicas de contaminantes primarios o precursores (por ejemplo, óxidos de nitrógeno y compuestos orgánicos volátiles) en presencia de oxígeno atmosférico y luz solar. Los principales efectos a la salud están asociados con el daño que ocasiona a las células en las vías respiratorias causando entre otros problemas, inflamación y reducción de la capacidad del aparato respiratorio tanto para combatir infecciones como para remover partículas externas, con ello se incrementan la incidencia a enfermedades respiratorias. En personas que son expuestas regularmente pueden presentar diversos síntomas, como: irritación ocular, de nariz y garganta, tos, dificultad y dolor durante la respiración profunda, dolor subesternal, opresión en el pecho, malestar general, debilidad, náusea y dolor de cabeza. Por otra parte. Los daños por exposición a ozono dependen de la sensibilidad de cada individuo y del tipo de exposición. La NOM-020-SSA1-1993 establece como límite horario permisible una concentración de 0.11 ppm en un periodo de tres años.

Hasta ahora los datos recolectados muestran que es biológicamente posible que la inflamación crónica que produce este contaminante provoque un daño pulmonar capaz de disminuir, durante la vida adulta, la calidad de vida de las personas expuestas. Otro tipo de padecimiento asociado con la exposición constante al ozono es la alteración de las funciones de la arteria aorta y daños al sistema cardiovascular.

El ozono también daña a las plantas, disminuyendo el rendimiento de muchos cultivos al inferir directamente con la capacidad de las plantas para producir y almacenar alimento. Esta condición repercute directamente en su susceptibilidad a enfermedades, plagas y condiciones climáticas adversas. Las personas que pueden ser mayormente afectadas por exposición a ozono son niños y adultos mayores, debido a la susceptibilidad de su sistema inmunológico. El ozono es considerado como uno de los contaminantes de mayor preocupación en la actualidad, ya que es altamente oxidante y afecta a los tejidos vivos.

Las principales reacciones del ozono troposférico se discutirán en el apartado de esmog fotoquímico.

### ***Bióxido de azufre***

El bióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ) es un gas incoloro que en altas concentraciones puede ser detectado por su sabor y por su olor cáustico e irritante, se disuelve con facilidad en el agua para formar ácido sulfuroso ( $\text{H}_2\text{SO}_3$ ), el cual se oxida lentamente y forma ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) con el oxígeno del aire. Estas partículas de ácidos se dispersan en el ambiente en forma de lluvia, llovizna, niebla, nieve y rocío dando origen a un proceso de

acidificación de la tierra y cuerpos de agua. Este fenómeno es conocido como lluvia ácida.

El  $\text{SO}_2$  se origina por la combustión de combustibles que contienen azufre (diesel y combustóleo principalmente) y por la fundición de minerales ricos en sulfatos. Se genera principalmente por la industria (incluyendo las termoeléctricas), seguido de los vehículos automotores.

La permanencia media de  $\text{SO}_2$  en la atmósfera es de algunos días, y depende de la rapidez con la cual se convierta en ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) por absorción de humedad y en partículas de sulfatos por acción de la radiación solar.

En altas concentraciones el bióxido de azufre puede ocasionar dificultad para respirar, humedad excesiva en las mucosas de las conjuntivas, irritación severa en vías respiratorias e incluso en el interior de los pulmones por formación de partículas de ácido sulfúrico, ocasionando vulnerabilidad en las defensas.

El bióxido de azufre es causante de enfermedades respiratorias como broncoconstricción, bronquitis y traqueitis, pudiendo llegar a causar broncoespasmos en personas sensibles como los asmáticos, agravamiento de enfermedades respiratorias y cardiovasculares existentes y la muerte; si bien los efectos señalados dependen en gran medida de la sensibilidad de cada individuo, los grupos de la población más sensibles al bióxido de azufre incluye a los niños y ancianos, a los asmáticos y a aquellos con enfermedades pulmonares crónicas como bronquitis y enfisema.

La combinación de óxidos de azufre y partículas suspendidas actúan sinérgicamente produciendo un efecto combinado mucho más nocivo que el efecto individual de cada uno de ellos por separado. Experimentos realizados en animales expuestos a concentraciones de  $\text{SO}_2$  de 9 a 50 ppm, muestran cambios morfológicos y funcionales permanentes similares a los que presenta la bronquitis crónica.

La OMS recomienda como límite para preservar la salud pública una concentración de 100 a 150  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  promedio de 24 horas, y de 40 a 60  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  en una media aritmética anual. La Norma Oficial Mexicana NOM-022-SSA1-1993 establece como límite de protección a la salud, una concentración de  $\text{SO}_2$  de 0.13 ppm (ó 341  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) promedio de 24 horas, una vez al año, y 0.03 ppm (ó 79  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) en una media aritmética anual para protección de la población susceptible.

### ***Óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ )***

El término óxidos de nitrógeno incluye al monóxido de nitrógeno ( $\text{NO}$ ) y al bióxido de nitrógeno ( $\text{NO}_2$ ).

### ***Monóxido de nitrógeno***

Es un gas incoloro, inerte en temperatura normal pero oxidante en temperaturas altas. Se produce en combustiones realizadas a más de 1,100 °C, por oxidación de nitrógeno atmosférico. También se forma durante la fabricación de ácidos nítrico y sulfúrico, así como también en la nitración industrial. Se estima que el 10% de óxido nítrico es originado en procesos industriales, mientras que el 90% restante proviene de la combustión del petróleo y sus derivados, el carbón o el gas natural.

### ***Bióxido de nitrógeno***

Gas de color pardo rojizo y olor desagradable que en la temperatura ambiente está en equilibrio con el monóxido de nitrógeno. Es el principal causante del color característico del smog fotoquímico. Su olor es detectable a partir de 240  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ . Se origina en las combustiones a altas temperaturas, tanto en las industrias como en los vehículos, en la fabricación del ácido nítrico y sulfúrico, en la nitración industrial y durante las tormentas eléctricas.

Entre sus efectos se encuentran la irritación pulmonar y el ataque al sistema cardiovascular. En materiales destiñe la pintura y ataca los conductores eléctricos. En las plantas provoca inhibición en el crecimiento, provoca la caída prematura de hojas y clorosis, además, disminuye la visibilidad.

Muchos de los efectos ambientales se atribuyen al  $\text{NO}_2$  se deben en realidad a los productos de diversas reacciones asociados. En presencia de la luz solar el  $\text{NO}_2$  se disocia en  $\text{NO}$  y  $\text{O}$ , donde el oxígeno atómico reacciona con el oxígeno molecular del ambiente para producir ozono. Por otra parte el  $\text{NO}_2$  reacciona con el radical  $\text{OH}$  para producir partículas de ácido nítrico, las cuales se dispersan en el ambiente en forma de lluvia, llovizna, niebla, nieve y rocío, dando a un proceso de acidificación de la tierra y cuerpos de agua.

La acumulación de bióxido de nitrógeno, en el cuerpo humano, constituye un riesgo para las vías respiratorias ya que se ha comprobado que: inicia, reactiva y puede alterar la capacidad de respuesta de las células en el proceso inflamatorio, como sucede con las células polimorfonucleares, macrófagos alveolares y los linfocitos, siendo más frecuente en casos de bronquitis crónica.

La Norma Oficial Mexicana NOM-023-SSA1-1993 especifica que la concentración de bióxido de nitrógeno, como contaminante atmosférico, no debe rebasar el límite máximo normado de 0.21 ppm o lo que es equivalente a 395  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , en una hora una vez al año, como protección a la salud de la población susceptible.

### ***Hidrocarburos***

De acuerdo a Jiménez (2002) las principales fuentes de emisión de hidrocarburos son las industrias del petróleo y del gas natural, así como los vehículos automotores, tanto por efectos de evaporación como por una deficiente oxidación de los combustibles.

Los efectos de los hidrocarburos se pueden diferenciar, de manera general, por grupos; los de tipo parafínico son asfixiantes por desplazamiento del oxígeno, los alquenos o oleofínicos se caracterizan por ser muy reactivos en la atmósfera al igual que los alquinos, aunque, estos últimos rara vez se encuentran en el aire, los cíclicos, en especial los aromáticos, presentan diferentes propiedades tóxicas y anestésicas.

La existencia de estos contaminantes se debe a la emisión de hidrocarburos no quemados y a la formación de otras especies durante la combustión, así como la evaporación de compuestos orgánicos volátiles (COV's) emitidos en diversas actividades industriales, especialmente en la fabricación, almacenamiento y aplicación de solvente y pinturas.

La principal razón para su control radica en que muchos de ellos son precursores de oxidantes fotoquímicos.

Los COV's más reactivos en el aire urbano son los hidrocarburos que contienen un doble enlace carbono-carbono ya que pueden adicionar radicales libres. Existen otros hidrocarburos que están presentes en el aire y que pueden reaccionar, si bien a velocidades de reacción lentas, sin embargo, estas reacciones pueden ser importantes en las etapas últimas del depósito del esmog fotoquímico.

### ***Partículas***

El término partículas se refiere a cualquier partícula sólida o líquida de hollín, polvo, aerosoles, humos y nieblas. Algunas clasificaciones del material particulado son: partículas totales, partículas primarias y secundarias, partículas suspendidas totales (PST), partículas con diámetro aerodinámico menor que 10 micras (PM<sub>10</sub>) y partículas con diámetro aerodinámico menor que 2.5 micras (PM<sub>2.5</sub>).

Las partículas primarias incluyen a los materiales sólidos, líquidos o gaseosos emitidos directamente por las fuentes de emisión y que pueden mantenerse en la atmósfera como partículas en condiciones ambientales de temperatura y presión. Las partículas secundarias son aerosoles formados a partir de material gaseoso a través de reacciones químicas atmosféricas.

Las PST están integradas por toda la materia emitida como formas sólidas, líquidas y vapor, pero que están suspendidas en el aire como sólidos o líquidos particulados, Las PST pueden incluir partículas con un diámetro aerodinámico de hasta 100µm. Cabe mencionar que las de tamaño mayor tienden a depositarse rápidamente y no deben ser consideradas como emisiones al aire. Por otro lado, dado que la deposición de las

partículas con un diámetro entre 30 y 100  $\mu\text{m}$  es considerada inestable, las partículas suspendidas son definidas como todas las partículas con un diámetro menor que 30  $\mu\text{m}$ .

El tamaño de las partículas  $\text{PM}_{10}$  o  $\text{PM}_{2.5}$  les permite entrar fácilmente en los espacios alveolares de los pulmones humanos, donde pueden depositarse y causar efectos adversos sobre la salud.

Las fuentes de emisión de partículas pueden ser naturales o antropogénicas. Entre las fuentes naturales se encuentran: erosión del suelo, material biológico fraccionado, erupciones volcánicas, incendios forestales, etc. Entre las fuentes antropogénicas se encuentran: combustión de productos derivados del petróleo, quemas en campos agrícolas y diversos procesos industriales.

Las partículas pueden tener una composición fisicoquímica homogénea o estar constituidas por diversos compuestos orgánicos e inorgánicos. Entre los componentes orgánicos se encuentran: fenoles, ácidos, alcoholes y material biológico (polen, protozoarios, bacterias, virus, hongos, esporas y algas). Entre los compuestos inorgánicos se encuentran nitratos, sulfatos, polímeros, silicatos, metales pesados (hierro, plomo, manganeso, zinc o vanadio) y elementos derivados de pesticidas y plaguicidas.

El riesgo a la salud por partículas lo constituyen su concentración en el aire y el tiempo de exposición; sin embargo, el tamaño es la característica física más importante para determinar su toxicidad y efectos en la salud humana.

Las partículas mayores a 10  $\mu\text{m}$  son retenidas básicamente en las vías respiratorias superiores y eliminadas en su mayor parte por el sistema de limpieza natural del tracto respiratorio, por lo que no son consideradas significativamente dañinas para la salud, sin embargo la exposición continua a altas concentraciones puede causar irritación de garganta y mucosas.

Por su parte, las  $\text{PM}_{10}$  (fracción respirable) no son retenidas en las vías respiratorias superiores, cerca de un tercio penetra hasta los pulmones. Su efecto depende de su composición química, pueden producir irritación de las vías respiratorias, agravar el asma y favorecer las enfermedades cardiovasculares. Se relacionan con la enfermedad de los pulmones negros en mineros, silicosis y asbestosis. En el corto plazo la contaminación por  $\text{PM}_{10}$  puede causar el deterioro de la función respiratoria. En el largo plazo se asocia con el desarrollo de enfermedades crónicas, el cáncer o la muerte prematura.

En el Valle de México estamos continuamente expuestos a las partículas que frecuentemente están combinadas con otras sustancias peligrosas. Este es el caso de las partículas más pequeñas que tienden a reaccionar con gases, confiriéndoles un alto grado de peligrosidad.

Una atmósfera contaminada con partículas suspendidas y con bióxido de azufre es particularmente perjudicial ya que paraliza los cilios epiteliales del tracto respiratorio, las partículas penetran hasta los pulmones donde se sedimentan. Los sólidos son entonces adsorbidos y concentran bióxido de azufre, aumentando el tiempo de contacto directo de este con los delicados tejidos pulmonares. Se ha observado un aumento en la mortalidad en la población en general cuando las concentraciones tanto de partículas en suspensión como de óxidos de azufre exceden  $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$  (equivalente a 0.19 ppm de  $\text{SO}_2$ ) durante 24 horas. El aumento es principalmente, en grupos vulnerables de la población, especialmente en los individuos con problemas cardiacos o pulmonares.

La Norma Oficial Mexicana NOM-025-SSA1-1993 establece que la concentración de partículas menores de 10 micras, como contaminantes atmosféricos, no deben rebasar el límite permisible de  $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ , en 24 horas una vez al año y  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$  en una media aritmética anual, para protección a la salud de la población susceptible.

**Tabla 1** Normas Oficiales Mexicanas de la evaluación de la calidad del aire

Contaminante	Límite de exposición aguda	Límite de exposición crónica (valor medio)		Norma
		Frecuencia máxima aceptable	Para protección de la salud de la población susceptible	
$\text{O}_3$	0.11 ppm (1 hrs.)	1 vez cada 3 años	na	NOM-020-SSA-1993
$\text{SO}_2$	0.13 ppm (24 hrs.)	1 vez al año	0.030 ppm (maa)	NOM-022-SSA-1993
$\text{NO}_2$	0.21 ppm (1 hrs.)	1 vez al año	na	NOM-023-SSA-1993
$\text{CO}$	11 ppm (8 hrs.)	1 vez al año	na	NOM-021-SSA-1993
$\text{PST}$	$260 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (24 hrs.)	1 vez al año	$75 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (maa)	NOM-024-SSA-1993
$\text{PM}_{10}$	$150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (24 hrs.)	1 vez al año	$50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (maa)	NOM-025-SSA-1993

na: No aplica

maa: Media aritmética anual



## Esmog fotoquímico

El término esmog combina las palabras fog (niebla) y smoke (humo). La principal característica del esmog fotoquímico es su elevada concentración de oxidantes, principalmente ozono y peróxidos, producidos por las reacciones fotoquímicas.

Los episodios de esmog fotoquímico son el principal proceso de producción de ozono troposférico. La manifestación más obvia del esmog es la formación de neblina de un color-gris-pardusca, aerosol de baja humedad, que es debida a la presencia en el aire de pequeñas gotas de agua que contienen productos de reacciones químicas, las cuales tienen lugar entre los contaminantes primarios del aire. Los productos intermedios y finales de las reacciones en el esmog pueden afectar a la salud humana y causar daño a las plantas, animales y algunos materiales (Colin, 2001).

Su origen son procesos fotoquímicos en los que intervienen óxidos de nitrógeno e hidrocarburos emitidos por los automóviles, las industrias y hidrocarburos emitidos por la vegetación de áreas rurales.

El monóxido de nitrógeno y los hidrocarburos son productos comunes de las actividades humanas y son emitidos en grandes cantidades diariamente. En áreas urbanas, bajo condiciones meteorológicas estables, estos contaminantes se acumulan en la capa límite y debido a la radiación solar ultravioleta las reacciones fotoquímicas se llevan a cabo, estas reacciones producen ozono, aldehídos y peroxiacetilnitrato (PAN).

Para que una ciudad este sometida a un evento de esmog fotoquímico, deben darse diversas condiciones; en primer lugar debe haber un tráfico importante que emita al aire suficiente NO, hidrocarburos y otros compuestos orgánicos volátiles. En segundo lugar, el tiempo debe ser cálido y lucir mucho sol, con el fin de que las reacciones cruciales, las cuales son fotoquímicas, ocurran a una velocidad elevada. Finalmente, debe haber, relativamente poco movimiento de masas de aire de manera que los reactivos no se diluyan. La ciudad de México se ajusta a las condiciones que propician el esmog fotoquímico. Durante cualquier episodio de contaminación fotoquímica se observan las siguientes etapas (Colin, 2001):

1. A primeras horas de la mañana se incrementa la concentración de NO hasta llegar a un máximo, como consecuencia de las emisiones procedentes de los motores de combustión.
2. Seguidamente se observa un máximo de NO<sub>2</sub>
3. Por ultimo la concentración de ozono, que relativamente baja a las primeras horas del día, se incrementa cuando las radiaciones solares contribuyen a las reacciones fotoquímicas, al tiempo que las concentraciones de NO y NO<sub>2</sub> disminuyen. Como se muestra en la Figura 2:

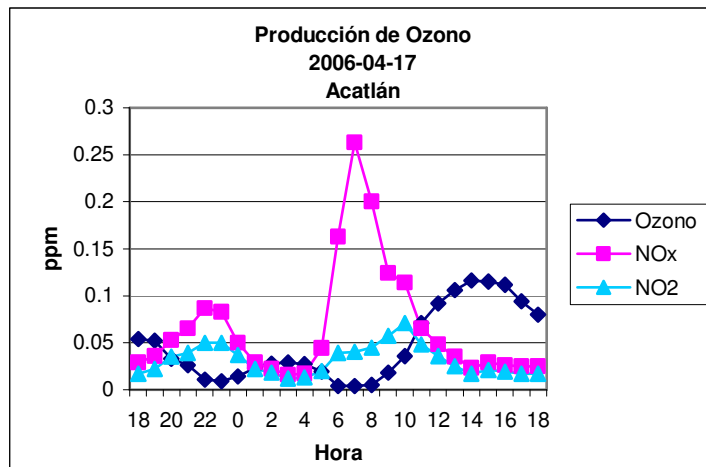
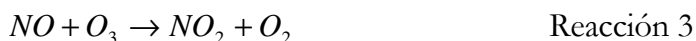
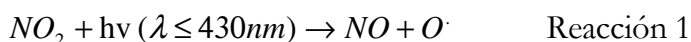


Fig. 2 Producción de ozono, fuente: RAMA.

Cabe resaltar que debido al transporte de largo alcance de los contaminantes primarios y secundarios incorporados en corrientes de aire, muchas áreas que por ellas mismas generan pocas emisiones de precursores están sujetas a exposiciones de ozono a nivel del suelo y de otros oxidantes en el esmog. De hecho, algunas áreas rurales y ciudades pequeñas que se encuentran en el camino de las masas de aire contaminado experimentan niveles de ozono incluso más altos que los correspondientes a áreas urbanas vecinas mayores, ya que en las grandes ciudades, parte del ozono transportado de otros lugares es eliminado por la reacción con el monóxido de nitrógeno emitido por los automóviles locales. De esta forma el problema de esmog fotoquímico es un problema regional.

Teniéndose las siguientes reacciones debidas a la fotólisis del  $\text{NO}_2$ :

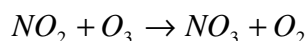
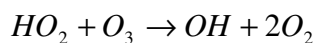
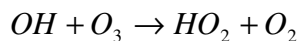


Esta última reacción se erige como un pilar fundamental del conjunto de la química atmosférica. La troposfera rige la composición del resto de las capas de la atmósfera, debido a que es la única región de la atmósfera que intercambia materia continuamente. Dicho intercambio tiene lugar con la litosfera, la hidrosfera y la biosfera, de forma que el comportamiento de un determinado compuesto no sólo depende de su reactividad, sino que también en un alto grado de los mecanismos de deposición que lo eliminan de la atmósfera.

Tenemos por consiguiente que la química troposférica viene gobernada por un proceso cíclico que depende exclusivamente de las concentraciones de  $\text{NO}_x$  y ozono. Un análisis del mismo considerando la aproximación del estado estacionario nos indica que la concentración de ozono que se deriva de esta serie de reacciones viene dada por la siguiente relación:

$$[O_3] = \frac{J_{NO_2} [NO_2]}{k[NO]}$$

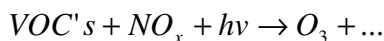
En donde  $J_{NO_2}$  es la velocidad de la fotólisis del  $NO_2$  y  $k$  la constante de velocidad de la reacción entre el  $NO$  y el  $O_3$ . Esta relación es mucho más que el resultado de la serie de tres reacciones básicas responsables de los niveles de ozono en la troposfera. Tiene además un interés práctico, ya que comúnmente ha sido utilizada en modelos computacionales aplicados sobre la química troposférica con el objeto de ahorrar tiempo computacional. Esta reacción deja de ser efectiva cuando intervienen otros mecanismos de pérdida del ozono como pueden ser las reacciones con compuestos orgánicos insaturados.



La concentración de ozono únicamente se dispara hacia niveles perniciosos cuando irrumpen en el ciclo los radicales  $ROO\cdot$  que se forman por reacción de los VOC's con los radicales  $OH$  (Reacción 4). El incremento de la concentración de ozono se debe a que los radicales  $ROO\cdot$  desplazan el equilibrio hacia la formación de  $NO_2$  (Reacción 5), con lo que se elimina todo el  $NO$  disponible invalidando la reacción que regula la concentración de ozono en la troposfera (Reacción 3)



El  $NO_2$  formado acaba dando lugar al ozono troposférico a través del desplazamiento del equilibrio que se establece entre las Reacciones 1-3. En definitiva, en cualquier episodio de contaminación fotoquímica se puede resumir por medio de la siguiente reacción simbólica:



Al margen de lo que ocurre con el ozono estratosférico y de las cruciales implicaciones que tiene éste en la química de dicha región, es también el ozono el principal agente determinante de la química troposférica, aunque en este caso sea como compuesto nocivo e irritante que puede llegar a causar innumerables problemas de salud, tanto para el ser humano como para el desarrollo de las plantas y los animales.

## CAPÍTULO 2

### DESCRIPCIÓN DEL MODELO

El modelo MCCM (Multiscale Climate and Chemistry Model), fue desarrollado por el Instituto Fraunhofer en Alemania, cuya principal característica es el acoplamiento entre la química atmosférica con la meteorología, es un modelo a multiescalas que permite modelar la calidad del aire en la zona del Valle de México ya que considera efectos de gran escala, como la situación sinóptica o el transporte de masas de aire con especies químicas específicas, así como también procesos a menor escala.

El MCCM es un modelo que:

- acopla directamente los procesos meteorológicos y químicos
- incluye la química de la fase gaseosa, deposición, emisiones antropogénicas y biogénicas
- incorpora una descripción explícita de los procesos de precipitación de nubes
- posee la capacidad de anidamientos múltiples y
- trabaja en diferentes arquitecturas y en paralelo

Para efectos de modelación se requiere conocer los contaminantes emitidos a la atmósfera, con resoluciones espaciales y horarias adecuadas al modelo.

Debido a la complejidad de los procesos involucrados en la fotoquímica de los contaminantes, especialmente en regiones con terreno complejo es útil que el transporte de contaminantes pueda reaccionar directamente a los cambios en otro plazo de condiciones meteorológicas, los cuales son sólo posibles en un modelo acoplado como el MCCM. Debido a su capacidad intrínseca de predicción de clima y a que se encuentra directamente acoplado a procesos químicos, el MCCM se puede aplicar en tiempo real a la predicción regional y urbana de la calidad del aire.

El MCCM se basa en el modelo a mesoescala de quinta generación de NCAR/Penn State (National Center for Atmospheric Research/Pennsylvania State University), MM5 (mesoscale model) (Grell *et al.* 1994). El MM5 incluye la capacidad de anidamiento múltiple, dinámica no-hidrostática (Dudhia 1993) y la asimilación de datos en cuatro dimensiones no-hidrostática (Stauffer y Seaman 1994) así como también otras opciones de modelación de procesos microfísicos.

Adicionalmente posee dos mecanismos detallados de la fase gaseosa RADM2 (Rain Acid Deposition Model versión 2) y RACM (Regional Atmospheric Chemistry Mechanism) (Stockwell *et al.* 1995, 1997) con 39 y 47 especies químicas respectivamente. En asociación con la química de la fase gaseosa se encuentran los submodelos que contienen 21 y 23 frecuencias de fotólisis y se calculan de acuerdo a la cobertura de las nubes, ozono, temperatura y presión en la atmósfera del modelo. Las emisiones biogénicas se calculan con base en los datos de uso de suelo, temperatura superficial y radiación. El modelo calcula simultáneamente los cambios meteorológicos y químicos en el dominio del modelo y genera las distribuciones tridimensionales dependientes del tiempo de las principales especies orgánicas e inorgánicas relevantes a la formación de oxidantes. Una ventaja del acoplamiento en línea de la meteorología y la química es que provee resultados consistentes sin la interpolación de datos en contraste con modelos no acoplados de química y transporte.

Para realizar una corrida del programa MCCM se utilizan los siguientes programas.

TERRAIN, REGRID, RAWINS o LITTLE\_R, INTERPF, INTCHEM, MCCM, NESTDOWN, MCCM (para dominio anidado).

Los cuales se definen a continuación:

### **Procesadores**

#### ***TERRAIN***

El módulo TERRAIN especifica los dominios y la posición de los mismos. Prepara la topografía y la información de uso de suelo mediante la interpolación por longitud-latitud de la elevación del terreno, uso del suelo y cobertura vegetal a una malla rectangular del MCCM. Este módulo TERRAIN incluye para el MCCM 25 categorías de uso de suelo para México.

Los archivos de salida de TERRAIN son *TERRAIN\_DOMAIN1...*  
*TERRAIN\_DOMAINn*.

#### ***REGRID***

El propósito de REGRID es leer análisis meteorológicos archivados o salidos de modelos a gran escala en niveles de presión e interpolarlos de una malla horizontal a la malla específica en TERRAIN. REGRID es una aplicación del sistema MM5 sin ninguna modificación.

REGRID consiste en dos componentes, pregrid y regridder.

Pregrid lee diferentes formatos de archivos de entrada y convierte en un formato simple a los archivos de salida que serán leídos posteriormente por regridder. La salida de pregrid

son archivos con datos meteorológicos tridimensionales, temperatura superficial de mar y nieve, un archivo por cada intervalo de tiempo dentro del análisis.

Regridder interpola cada archivo de pregrid en la malla horizontal de MCCM especificada en el archivo *TERRAIN\_DOMAIN1*. La salida es un archivo con el nombre de *REGRID\_DOMAIN1*, aquí las variables todavía se encuentran en niveles de presión. La información de entrada requerida por regridder son los archivos de salida de *TERRAIN* y los archivos de pregrid. Es posible correr regridder para múltiples dominios.

### ***RAWINS/LITTLE\_R***

El propósito de *RAWINS/LITTLE\_R* es mejorar la primera aproximación de los datos de entrada meteorológicos, que son generados por regridder, con observaciones. Estas pueden ser por tanto de superficie como radio sondeos.

### ***INTERPF***

El preprocesador *INTERPF*, es la versión original del MM5 e interpola las salidas de *REGRIDDER*, *RAWINS* o *LITTLE\_R* de los niveles de presión a los niveles de  $\sigma$  de MCCM.

La salida de *INTERPF* son las condiciones iniciales meteorológicas que es el archivo *MMINPUT\_DOMAINn*, las condiciones de frontera dependientes del tiempo de las variables meteorológicas es el archivo *BDYOUT\_DOMAINn* y las condiciones de la frontera inferior es *LOWBDY\_DOMAINn*.

### ***INITCHEM***

Suministra los valores de concentración típicos de las variables químicas para todos los puntos de la malla del dominio. Actualmente *initchem* suministra una distribución homogénea horizontal para todas las especies químicas. Los valores de concentración se distinguen entre capa límite, troposfera libre y troposfera superior. Las concentraciones de todas las especies pueden modificarse por el usuario dentro de los programas.

### ***MCCM***

Es la parte del sistema de modelación, donde la predicción de la meteorología y el transporte de contaminantes toman lugar.

El MCCM consiste en una parte meteorológica, que principalmente equivale a MM5 y a la parte acoplada de química, intercambio turbulento, emisiones antropogénicas y biogénicas, deposición y transformaciones químicas. Además de la estimación de las especies químicas en la fase gaseosa, MCCM incluye la predicción de  $PM_{10}$  y  $PM_{2.5}$ , que toma en consideración la advección, el transporte turbulento, la emisión y la deposición.

En la parte meteorológica, la diferencia se encuentra en el empleo de suelo diferente con un tratamiento mejorado de la capa límite de la superficie.

Para la química en la fase gaseosa el modelo emplea el mecanismo 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 de 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 OH. Los factores de agregación para los compuestos más comunes son obtenidos de Middleton *et al.* (1990).

### *RADM2*

El RADM2 es el mecanismo 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 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 la de los aldehídos, incluso 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.

### ***NESTDOWN***

Este programa genera los datos de entrada para dominios anidados en el caso de MCCM se encuentra ligeramente modificado del programa MM5, con él se incrementa el tamaño del arreglo para acomodar las variables adicionales de la química.

## **Inventario de Emisiones**

Actualmente el programa utiliza un inventario de emisiones que fue generado 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 la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Rheinland Safety and Environmental Protection GmbH (TÜV). El año base de este inventario de emisiones es de 1998.

Para lograr un inventario de emisiones se normalizan los datos, ya que la recolección de estos se encuentran en diferentes formatos, unidades, etc., la información necesita una distribución espacial de las emisiones de área y puntuales, localizándose en el dominio de modelación; y se distribuyen las emisiones en forma horaria dependiendo del tipo de fuente. Se realiza la especiación para los COV's y redistribuyendo la emisión en los diferentes compuestos emitidos por el tipo de fuente, se incluyen las emisiones lineales, todo se agrupa en un formato tal que es compatible con el modelo MCCM. Cabe mencionar que el inventario de emisiones fue creado para un proyecto de investigación de doctorado en el Centro de Ciencias de la Atmósfera de la UNAM.

### ***Resolución espacial y temporal del escenario***

Para las categorías de emisión que incluyen las fuentes puntuales, bosques (emisiones biogénicas) 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. Para las fuentes móviles se calcula la distribución horaria empleando datos específicos de tráfico vehicular.

### ***Emisiones Biogénicas***

Para conocer la emisión de fuentes biogénicas se requiere de información sobre el tipo de vegetación que cubre el área de modelación.

La vegetación emite compuestos orgánicos. Dichos compuestos contribuyen considerablemente en la formación de ozono, especialmente en los días calurosos de verano debido a que la emisión se incrementa con la temperatura. El modelo MCCM contiene un módulo de emisiones biogénicas basado en la descripción de Guenther *et al.* (1993, 1994); Simpson *et al.* (1995) y Schoenemeyer *et al.* (1997). En RADM2 los COV's se agrupan de acuerdo a su estructura y reactividad. 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.



### ***Emisiones Antropogénicas***

#### *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 (acrónimo de datos generales) generada y mantenida por el Instituto Nacional de Ecología. Contempla alrededor de 3,229 fuentes en el Distrito Federal y 224 fuentes en los estados circundantes de Morelos, Puebla, Tlaxcala, Querétaro, Hidalgo y México.

#### *Emisiones de área*

En este inventario de emisiones se tienen las emisiones tanto de compuestos inorgánicos ( $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_x$ ) como de los COV's.

#### *Emisiones móviles*

Las emisiones móviles provienen del TESUM (TÜV Emisión Simulation Model) 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, para cada uno de éstos sectores, se conoce el tipo de vehículo, el número, la velocidad en la que se desplazan y la longitud del sector.

## CAPÍTULO 3

### METODOLOGÍA

En este proyecto se evaluó el desempeño del MCCM para predicción de la calidad del aire. Se aplicaron métricas estadísticas propuestas por Willmott (1981) y por Tesche (1988). La evaluación se llevó a cabo comparando los datos obtenidos de la modelación con los valores reportados de las mediciones hechas por la Red Automática de Monitoreo Ambiental (RAMA).

Se utilizaron diferentes representaciones gráficas, con diferentes programas como Excel y Grads (Grid Analysis and Display System que es una herramienta que permite acceso, manipulación y visualización de datos geográficos) con la finalidad de observar los comportamientos de los diferentes parámetros de forma horaria y por estación, también se utilizó la representación de distribución de contaminantes en el Valle de México y se utilizaron trayectorias de viento para conocer el transporte de contaminantes.

Con la evaluación del modelo se pudieron determinar los ajustes necesarios que el inventario de emisiones necesitaba. El inventario de emisiones fue modificado empleando de la técnica de modelación inversa.

El inventario de emisiones optimizado fue evaluado comparando el desempeño del modelo al utilizar los diferentes inventarios de emisiones (original y optimizado).

A continuación se describe la metodología de la técnica de la modelación inversa, la corrección meteorológica y la descripción de las métricas estadísticas.

#### **Modelación inversa**

La modelación inversa consistió en obtener emisiones de contaminantes a partir de mediciones ambientales (reportadas por la RAMA).

Se modificaron las emisiones contaminantes de acuerdo a las evaluaciones, utilizando factores de ajuste a las emisiones inventariadas, realizándose por área (localización geográfica) y por horario. Cabe mencionar que para NO, NO<sub>2</sub>, CO, SO<sub>2</sub> y PM<sub>10</sub> el factor de ajuste es una relación directa.

La modelación inversa se realizó tomando en cuenta la importancia de obtener datos fiables del pronóstico de ozono, debido a que es un contaminante que con frecuencia rebasa la norma de calidad del aire. El ozono depende de las concentraciones de NO<sub>x</sub> e hidrocarburos.

La optimización del inventario de emisiones fue un proceso de múltiples evaluaciones y reajustes de acuerdo a los resultados obtenidos de la modelación.

### Corrección meteorológica

La meteorología es uno de los forzantes en la generación de la contaminación en una región. Las intensidades bajas de viento inducen una poca dispersión y con ello un incremento en las concentraciones ambientales para una región con emisiones de contaminantes relativamente constantes.

Por lo que es importante que los resultados del modelo meteorológico sean representativos de la zona. La corrección del campo de vientos se realizó conforme a la descripción de García (2002) donde se obtiene el mejor índice de concordancia a partir de multiplicar un factor constante al campo de vientos. Esta corrección en la meteorología se llevó a cabo con la finalidad de obtener una mejor modelación de las especies contaminantes. Actualmente se encuentra en desarrollo la aplicación del MM5 urbano con el objetivo de resolver este problema a partir de parametrizaciones que describen adecuadamente los campos de viento sobre las zonas urbanas.

### Métricas estadísticas

Para evaluar el desempeño del modelo de forma cuantitativa se realizaron las siguientes métricas estadísticas (Willmott, 1981):

$$\sigma_p = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (p_i - \bar{p})^2 \right]^{1/2}$$

$$\sigma_o = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (o_i - \bar{o})^2 \right]^{1/2}$$

$$RMSE = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (p_i - o_i)^2 \right]^{1/2}$$

Donde  $\sigma_p$  y  $\sigma_o$  son las desviaciones estándar de los datos predichos y observados respectivamente, para un parámetro o contaminante dado en las N ubicaciones o puntos de monitoreo. Los parámetros  $p_i$  y  $o_i$  fueron tomados como promedio por hora para cada punto o estación de monitoreo, donde  $\bar{p}$  y  $\bar{o}$  son los valores de las medias para las

N ubicaciones. RMSD (root-mean-square-difference) es la raíz cuadrática de las diferencias medias entre los valores predichos y los observados.

Con estas herramientas se puede determinar el nivel de acierto del modelo, se considerado alto sí la desviación estándar de los datos de predicción es similar a la de los datos de observación, mientras que RMSD sea menor o igual a la desviación estándar de los datos observados.

La métrica RMSD esta compuesta por  $RMSD_s$  y  $RMSD_u$ .

$RMSD_s$  es la raíz sistemática cuadrática media de la desviación, entre valores medidos y modelados.

$$RMSD_s = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \hat{p}_i - o_i \right)^2 \right]^{1/2}$$

$RMSD_u$  es la raíz no sistemática cuadrática media de la desviación, entre valores medidos y modelados.

$$RMSD_u = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \hat{p}_i - p_i \right)^2 \right]^{1/2}$$

Donde:

$$\hat{p}_i = a + b o_i$$

Donde a y b son la ordenada y la pendiente respectivamente de la regresión lineal entre los datos observados y los datos predichos.  $RMSD_s$  es una medida de error sistemático en el modelo de predicción mientras que  $RMSD_u$  describe la discrepancia no lineal entre las predicciones y lo observado, la cual puede ser interpretada como una medida de precisión que corresponde a errores aleatorios.

El índice de concordancia entre las predicciones y las observaciones de un parámetro es definido como:

$$I_c = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (p_i - o_i)^2}{\sum_{i=1}^N (|p_i - \bar{o}| + |o_i - \bar{o}|)^2}$$

Este índice compara las salidas de los valores de predicción con los valores observados. El rango posible para este índice es de 0 a 1, siendo el valor de 1 una concordancia perfecta.

Las mediciones Nge, Error Craso Normalizado (Normalized Gross Error) y Nb, Tendencia del Error Normalizado (Normalized Bias) fueron utilizadas para evaluar los errores del desempeño del modelo. (Tesche, 1988)

Nge esta definido por:

$$Nge = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|p_i - o_i|}{o_i}$$

Nb esta definido por:

$$Nb = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{p_i - o_i}{o_i}$$

Donde N es el número de estaciones de monitoreo  $p_i$  y  $o_i$  son los valores de los parámetros de pronóstico y observación.

Estas medidas de error también se pueden entender como porcentajes de error, cuando Nb es negativo quiere decir que en promedio los datos de pronóstico fueron menores a los medidos, y si es positivo los valores sobrepasan a las mediciones. El Nge muestra el error craso, es decir cuantifica los promedios de los errores sin importar si hubo sobrevaloración o si los datos de pronóstico fueron menores a los medidos.

Además se utilizaron dos métricas para calcular la exactitud de los picos (valores máximos de los parámetros)

El PPA (Paired Peak Accuracy), esta medida cuantifica la precisión de la predicción de picos realizada por el modelo en el sitio donde se observo la concentración máxima. Esta medida es dada por:

$$PPA = \frac{P_{x_i t}^{\wedge} - O_{x_i t}^{\wedge}}{O_{x_i t}^{\wedge}}$$

Donde  $\wedge$  indica los valores en el tiempo y la localización del valor observado.

Finalmente el TPPA (Temporally Paired Peak Accuracy) cuantifica la predicción de picos en relación al valor observado a la misma hora pero en cualquier sitio, esta dado por:

$$TPPA = \frac{P_{x_i t}^{\wedge} - O_{x_i t}^{\wedge}}{O_{x_i t}^{\wedge}}$$

Los factores con los cuales se modificó el inventario de emisiones fueron generados mediante los siguientes planteamientos:

- En primer instancia, un índice de concordancia bajo, indica que se requiere de una mejora.
- La representación gráfica horaria da una visión rápida del desempeño del modelo. Con esto se logra determinar en que áreas, y en que horario se requiere un ajuste al inventario de emisiones.
- Los factores se generaron al realizar un análisis de la magnitud de la diferencia de los valores observados y los valores generados por el modelo, estos factores de corrección se pueden generar mediante un análisis porcentual, dado que es una relación directa.

## CAPÍTULO 4

### RESULTADOS

Los siguientes resultados del desempeño del modelo fueron generados para el pronóstico del día 16 de Abril de 2006. Las horas marcadas en las gráficas indican la hora local.

#### Desempeño de la modelación meteorológica del modelo

##### Corrección al campo de vientos

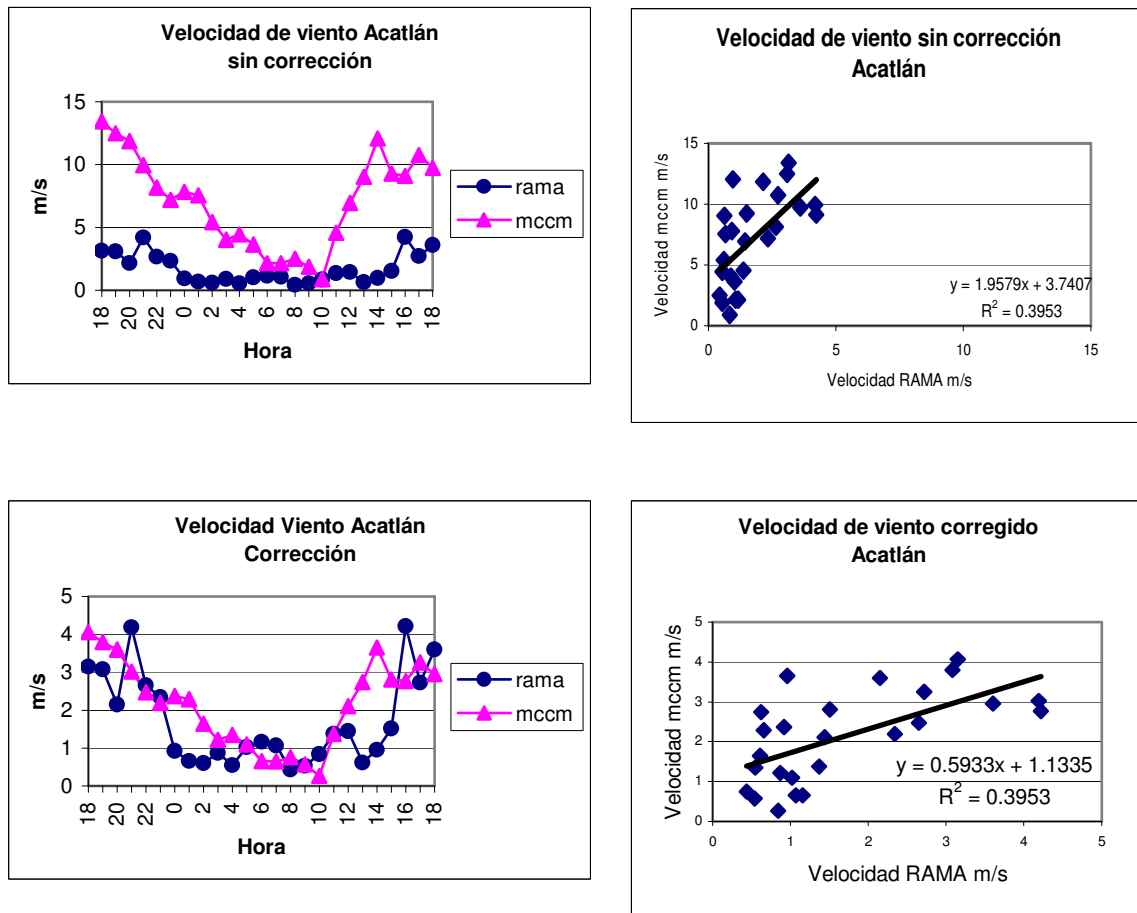
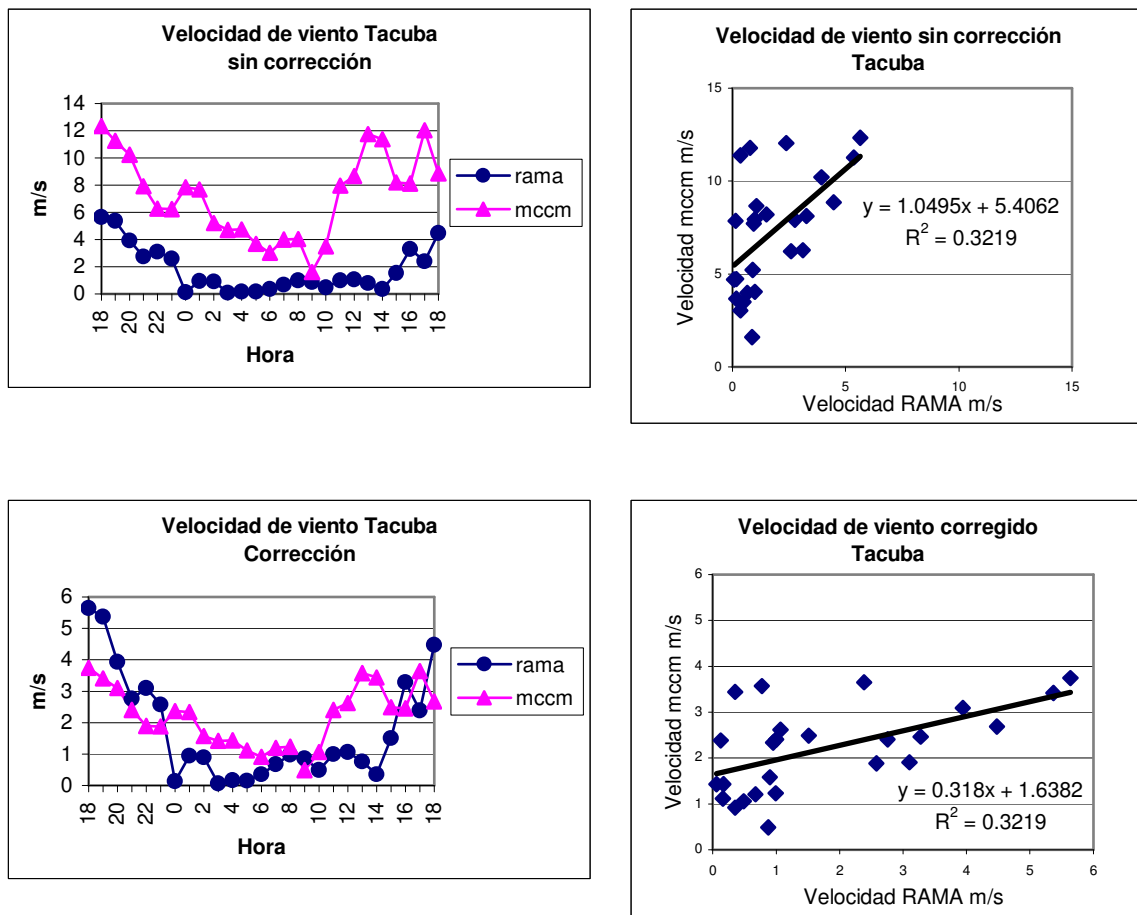


Fig. 3 Corrección al campo de vientos para la estación Acatlán.

**Tabla 2** Análisis estadísticos de la corrección al campo de vientos en la estación Acatlán

Estación	EAC Original	EAC Corregido
lc	0.315	0.771
$\sigma_o$	1.172	1.172
$\sigma_p$	3.651	1.106
RMSD <sub>S</sub>	5.492	0.648
RMSD <sub>U</sub>	2.839	0.86
RMSD	6.182	1.077
Nge	4.272	0.793
Nb	4.272	0.598



**Fig. 4** Corrección al campo de vientos para la estación Tacuba.

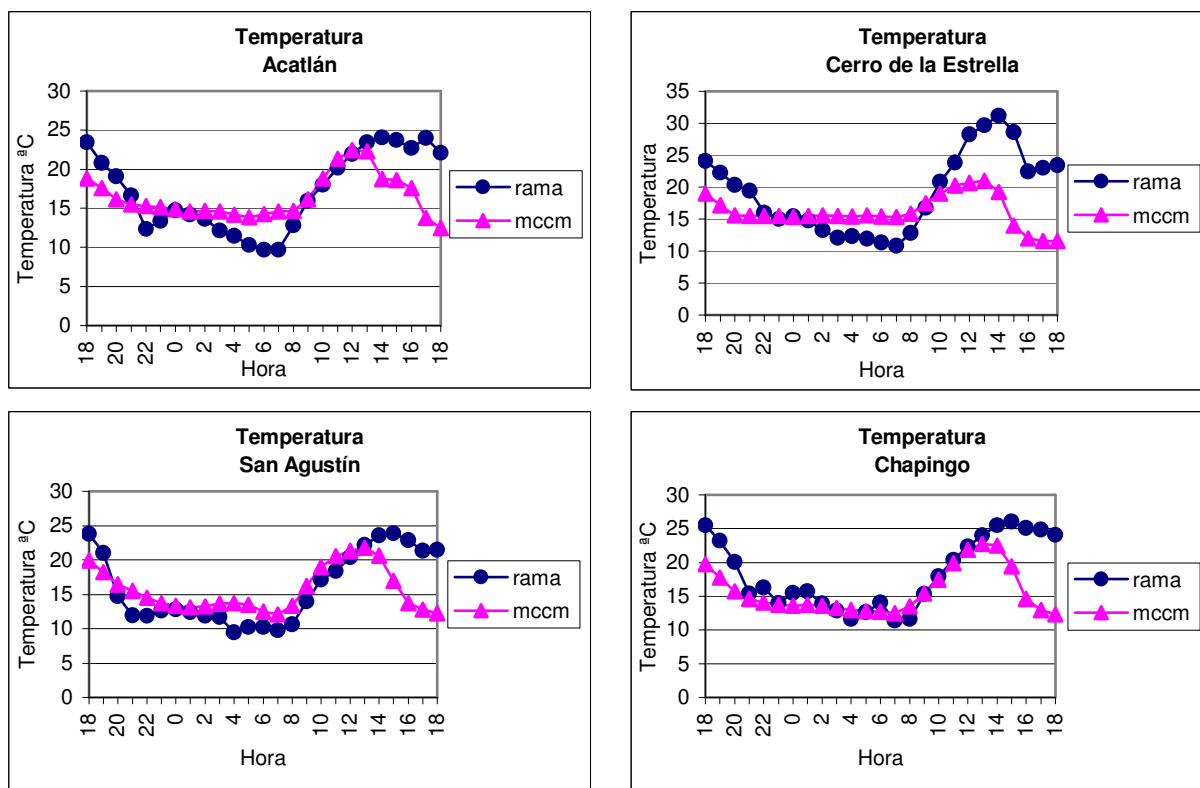


**Tabla 3** Análisis estadísticos de la corrección al campo de vientos en la estación Tacuba

Estación	TAC Original	TAC Corregido
lc	0.389	0.691
$\sigma_o$	1.658	1.658
$\sigma_p$	3.067	0.929
RMSD <sub>S</sub>	5.494	1.213
RMSD <sub>U</sub>	2.525	0.765
RMSD	6.047	1.434
Nge	11.975	3.155
Nb	11.975	2.932

En las Tablas 2 y 3, para Acatlán y Tacuba respectivamente, se observan las mejoras que presentaron los índices de concordancia y la disminución de las desviaciones estándar de los valores modelados al realizarse la corrección al campo de vientos. La ganancia del índice de concordancia para la estación Acatlán fue de 144% y en la estación Tacuba fue de 77%, con esta corrección se alcanzó una modelación de los contaminantes más apegada a la realidad en todo el Valle de México. El factor de ajuste para la corrección del campo de vientos se obtuvo de acuerdo a la metodología que propone García (2002), el valor de ajuste fue 3.3

*Desempeño de los parámetros meteorológicos*



**Fig. 5** Gráficas horarias de temperatura.

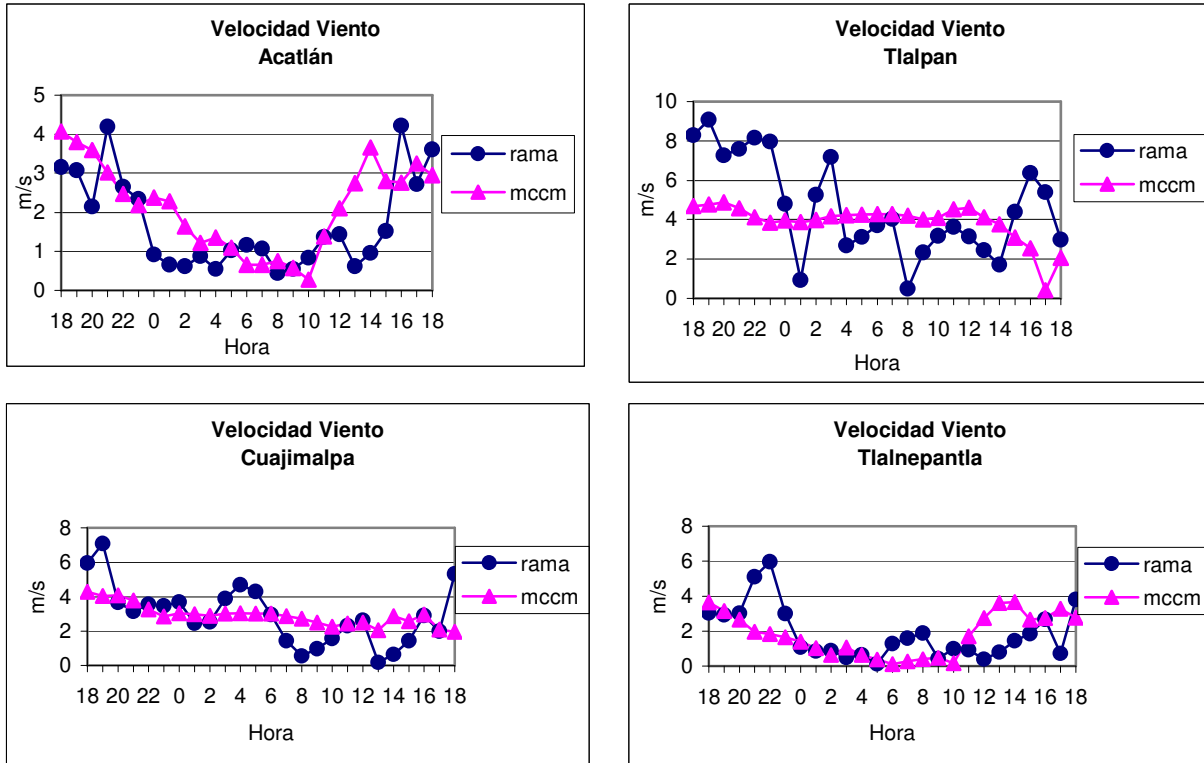


Fig. 6 Gráficas horarias de velocidad de viento (corregido).

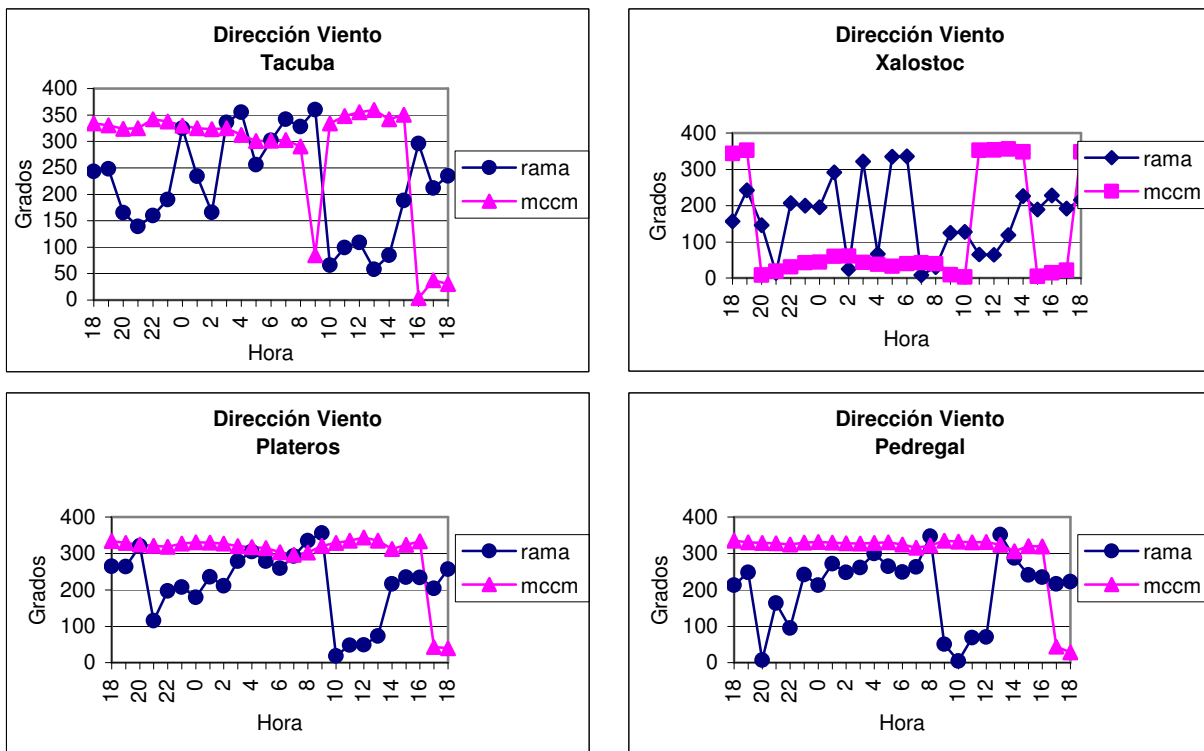


Fig. 7 Gráficas horarias de dirección de viento.

Como se puede observar en las gráficas horarias de la Figura 5 el modelo predice la temperatura con alto acierto con relación a los datos generados por la RAMA.

Las gráficas de la Figura 6 muestran la distribución horaria de las velocidades del viento una vez corregidas, se observa que los valores del modelo son similares a los valores observados. Con esta corrección se pudo optimizar el inventario de emisiones ya que la distribución y movimiento de contaminantes se apega más a la realidad. En la Figura 7 se aprecian las direcciones del viento. Con estos resultados de la predicción meteorológica se logró optimizar el inventario de emisiones.

### *Análisis estadísticos de la meteorología del día 16 de Abril de 2006.*

**Tabla 4** Análisis estadísticos de la modelación de la temperatura

Estación	$I_c$	$\sigma_o$	$\sigma_p$	RMSD <sub>S</sub>	RMSD <sub>U</sub>	RMSD	Nge	Nb
TAC	0.600	4.749	2.400	4.030	2.181	4.582	0.167	-0.033
EAC	0.711	4.998	2.688	3.450	2.133	4.056	0.187	0.016
SAG	0.747	5.144	3.127	3.224	2.455	4.052	0.198	0.042
TLA	0.697	5.109	2.739	3.954	2.186	4.518	0.157	-0.057
XAL	0.629	5.384	2.931	5.603	2.411	6.099	0.185	-0.180
MER	0.250	2.115	3.413	8.542	3.329	9.168	0.331	-0.331
PED	0.489	6.459	1.773	6.014	1.578	6.217	0.317	0.005
CES	0.518	6.160	2.518	6.059	2.353	6.500	0.248	-0.077
PLA	0.508	5.375	2.029	4.928	1.917	5.288	0.259	0.002
HAN	0.552	5.005	2.636	5.078	2.525	5.670	0.179	-0.096
CUA	0.621	2.979	1.913	3.017	1.713	3.469	0.138	-0.118
TPN	0.530	3.495	1.511	4.421	1.434	4.648	0.189	-0.161
CHA	0.734	5.134	3.318	3.965	2.514	4.695	0.143	-0.108
TAH	0.556	4.748	2.538	4.736	2.454	5.334	0.172	-0.080

**Tabla 5** Análisis estadísticos de la modelación de la velocidad de viento

Estación	$I_c$	$\sigma_o$	$\sigma_p$	RMSD <sub>S</sub>	RMSD <sub>U</sub>	RMSD	Nge	Nb
TAC	0.691	1.658	0.929	1.213	0.765	1.434	3.155	2.932
EAC	0.771	1.172	1.106	0.648	0.860	1.077	0.793	0.598
TLA	0.555	1.477	1.200	1.102	1.140	1.585	1.014	0.547
XAL	0.316	1.147	0.702	1.338	0.702	1.511	1.313	1.108
MER	0.392	0.914	0.577	1.374	0.566	1.486	1.191	1.138
PED	0.207	0.642	0.706	2.260	0.687	2.362	3.098	3.075
CES	0.494	1.115	0.921	1.491	0.904	1.744	2.776	2.626
PLA	0.407	0.685	0.679	1.784	0.604	1.883	2.389	2.389
HAN	0.459	1.001	0.872	1.045	0.866	1.357	1.246	1.067
CUA	0.580	1.674	0.598	1.322	0.484	1.408	0.979	0.764
TPN	0.304	2.433	0.951	2.456	0.947	2.632	0.855	0.406
CHA	0.309	1.758	0.517	1.719	0.515	1.794	0.735	0.406
TAH	0.470	1.715	0.994	1.812	0.990	2.064	1.318	1.083

**Tabla 6** Análisis estadísticos de la modelación de dirección de viento

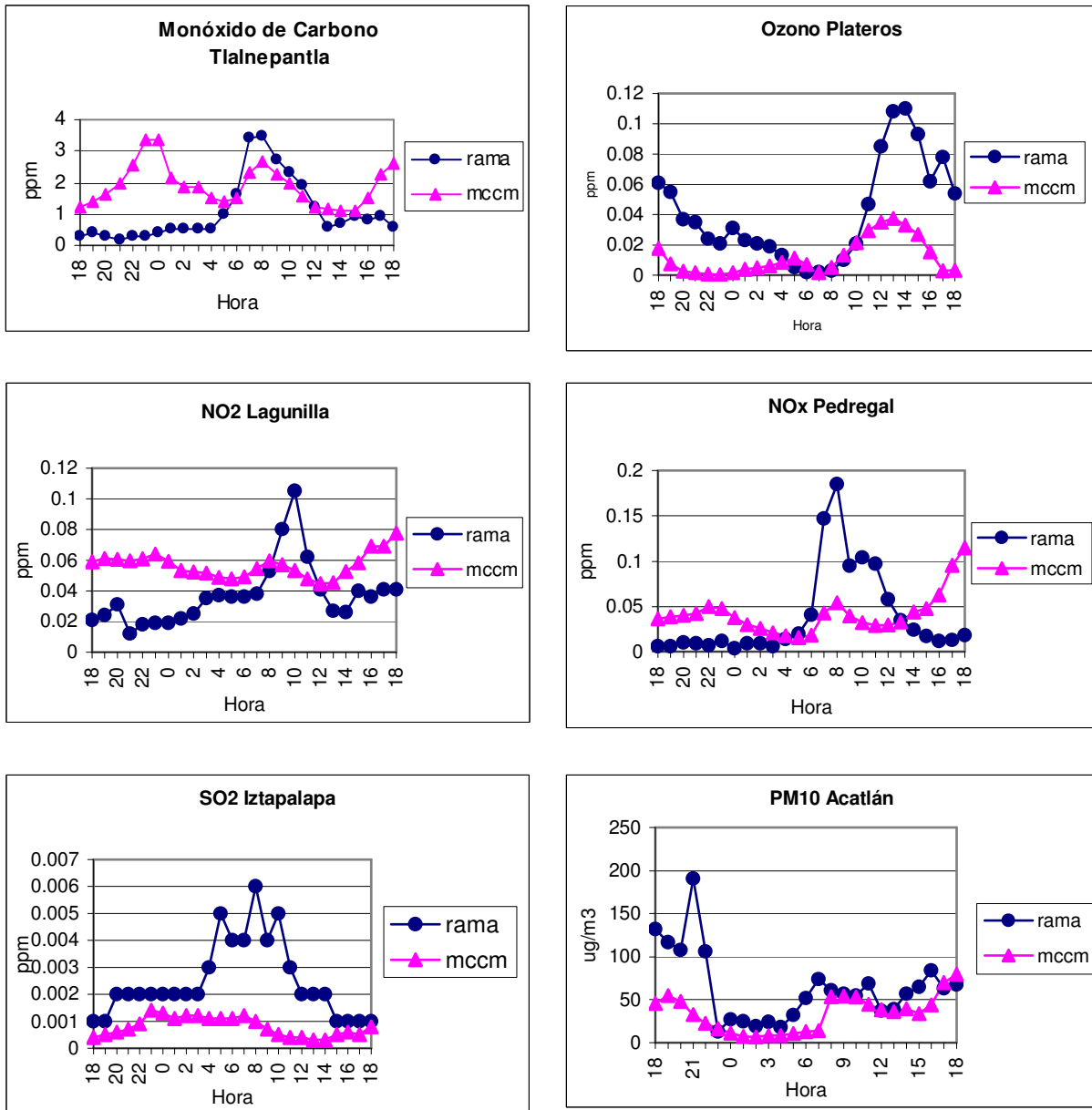
Estación	lc	Nge	Nb
TAC	0.479	1.128	0.821
EAC	0.411	1.155	0.657
TLA	0.384	0.841	-0.277
XAL	0.433	1.280	0.324
MER	0.451	1.106	0.769
PED	0.547	6.021	5.875
CES	0.293	8.547	8.482
PLA	0.550	1.664	1.517
HAN	0.416	1.786	1.095
CUA	0.475	2.124	1.938
TPN	0.327	2.018	1.965
CHA	0.445	0.766	-0.349

**Tabla 7** Promedios de las métricas estadísticas de los datos meteorológicos del día 16 de Abril de 2006

Parámetro	lc	Nge	Nb
Temperatura	0.581	0.205	-0.083
Velocidad de viento	0.458	1.604	1.395
Dirección de viento	0.441	2.338	1.901

En las Tablas 4, 5 y 6 se observa el desempeño de la meteorología. En la Tabla 7 se condensan las métricas estadísticas de los datos meteorológicos presentando un promedio de todas las estaciones.

**Desempeño del modelo MCCM utilizando el inventario de emisiones original.**



**Fig. 8** Gráficas horarias de modelación con inventario de emisiones original.

**Tabla 8** Análisis estadístico del desempeño del modelo utilizando el inventario de emisiones original

Parámetro	CO	Ozono	NO <sub>x</sub>	NO <sub>2</sub>	SO <sub>2</sub>	PM <sub>10</sub>
Estación	TLA	PLA	PED	LAG	UIZ	EAC
lc	0.480	0.554	0.220	0.349	0.446	0.555
$\sigma_o$	0.949	0.032	0.047	0.020	0.0021	40.863
$\sigma_p$	0.640	0.011	0.022	0.007	0.0004	20.626
RMSD <sub>S</sub>	1.212	0.037	0.048	0.028	0.0027	43.998
RMSD <sub>U</sub>	0.634	0.008	0.022	0.007	0.0004	18.789
RMSD	1.368	0.038	0.053	0.029	0.0028	47.842
Nge	2.55	0.78	2.60	1.01	0.58	0.446
Nb	2.46	-0.39	2.22	0.93	-0.58	-0.400

En la Figura 8 se presenta el desempeño del modelo, en estas gráficas horarias se observan que los resultados de pronóstico difieren de los datos reportados por la RAMA.

Para el monóxido de carbono en la estación Tlalnepantla se obtuvo un índice de concordancia de 0.480, se encontró una sobre valoración de las concentraciones tomando en cuenta el valor del Nge y Nb que fueron de 2.55 y 2.46; mientras que las desviaciones estándar de los datos observados y de los datos generados por el modelo no difieren entre si en gran medida.

La modelación de ozono para la estación Plateros obtuvo un índice de concordancia de 0.554, y se observa una subestimación de los valores de modelación, ya que Nge y Nb fueron de 0.78 y -0.39 respectivamente.

Para NO<sub>x</sub> en la estación Pedregal se obtuvo un índice de concordancia de 0.220, considerando el valor del error craso normalizado y la tendencia del error, los datos fueron sobrevalorados.

El desempeño del modelo para NO<sub>2</sub> en la estación Lagunilla, y para SO<sub>2</sub> en la estación Iztapalapa arrojó índices de concordancia de 0.349 y 0.470 respectivamente. De acuerdo a las medidas de error y las representaciones gráficas el NO<sub>2</sub> se encuentra sobreestimado y el SO<sub>2</sub> subestimado.

Para la modelación de PM<sub>10</sub> en la estación Acatlán el modelo subestimó las concentraciones de partículas, esto se nota gráficamente y de acuerdo a las métricas estadísticas de la Tabla 8, donde el valor de la tendencia del error es negativo (Nb), se obtuvo un índice de concordancia de 0.55

Con estos resultados se comprueba la necesidad de mejorar el inventario de emisiones.

***Análisis estadístico del desempeño de la modelación de ozono para todas las estaciones utilizando el inventario de emisiones original***

**Tabla 9** Análisis estadísticos del desempeño de la modelación de ozono al utilizar el inventario de emisiones original

Estación	lc	$\sigma_o$	$\sigma_p$	RMSD <sub>s</sub>	RMSD <sub>u</sub>	RMSD	Nge	Nb
TAC	0.579	0.032	0.012	0.039	0.007	0.039	0.792	-0.723
EAC	0.632	0.030	0.014	0.034	0.007	0.035	0.791	-0.791
SAG	0.723	0.034	0.019	0.031	0.008	0.032	0.641	-0.577
TLA	0.587	0.035	0.013	0.041	0.008	0.042	0.812	-0.812
XAL	0.632	0.031	0.013	0.033	0.007	0.034	0.806	-0.803
MER	0.378	0.015	0.011	0.049	0.007	0.050	0.793	-0.793
PED	0.494	0.035	0.011	0.043	0.010	0.044	1.339	0.369
CES	0.583	0.025	0.013	0.030	0.010	0.032	0.722	-0.296
PLA	0.554	0.032	0.011	0.037	0.008	0.038	0.785	-0.399
HAN	0.685	0.023	0.012	0.023	0.006	0.024	0.763	-0.763
CUA	0.534	0.020	0.012	0.030	0.008	0.031	0.569	-0.554
TPN	0.472	0.020	0.008	0.030	0.007	0.031	0.423	-0.358
CHA	0.607	0.022	0.015	0.029	0.010	0.031	0.596	-0.561
TAH	0.610	0.015	0.010	0.015	0.009	0.018	0.320	-0.177
UIZ	0.573	0.030	0.014	0.038	0.010	0.039	1.064	-0.120
TAX	0.677	0.014	0.011	0.011	0.009	0.015	0.790	-0.017
LAG	0.559	0.030	0.010	0.037	0.006	0.038	0.832	-0.739
AZC	0.575	0.037	0.013	0.046	0.007	0.046	0.835	-0.835

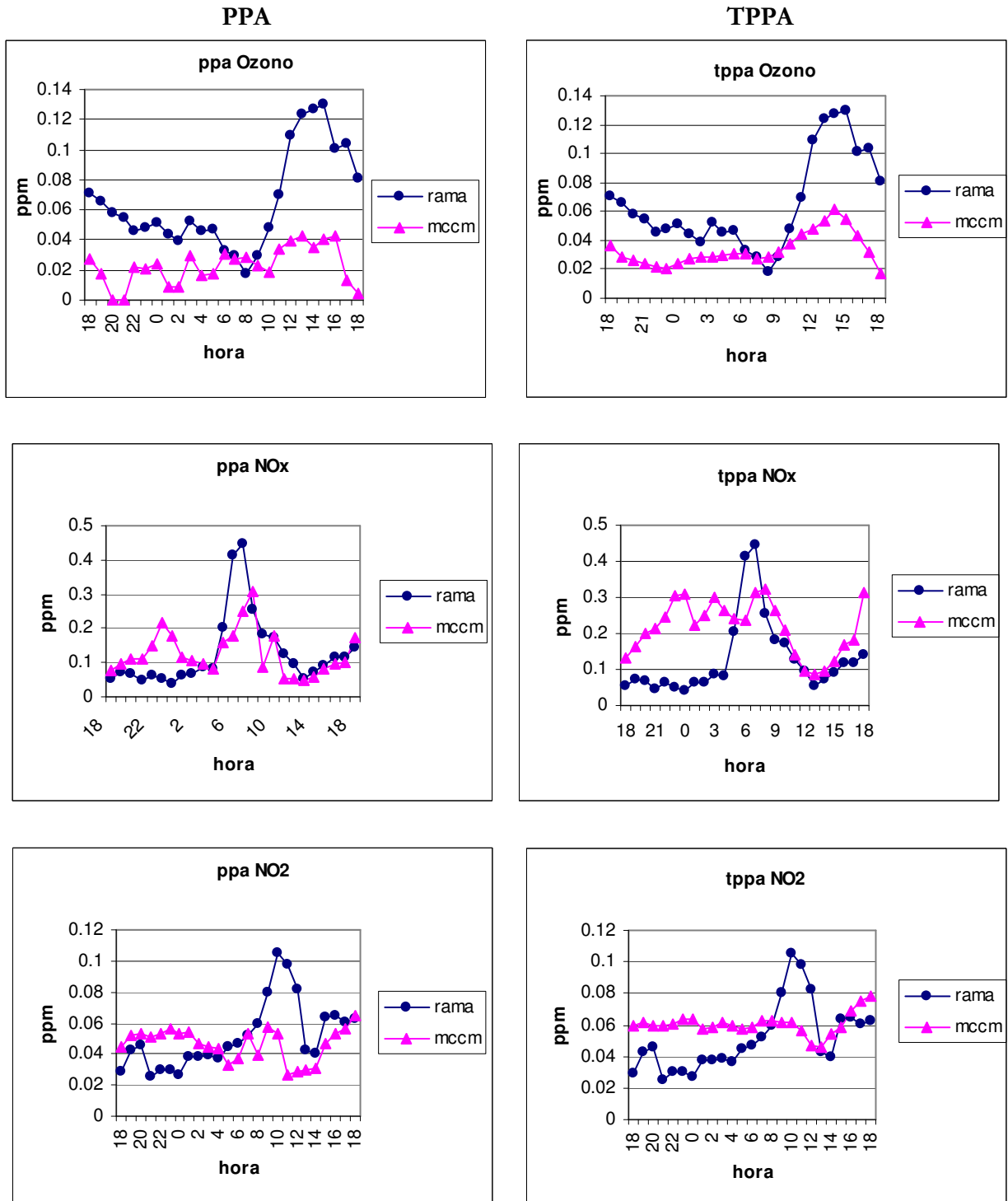
Considerando la información de la Tabla 9 se puede observar que la modelación de ozono esta siendo subestimada, ya que los valores de la tendencia del error normalizado (Nb) reporta valores negativos. Se puede observar que el índice de concordancia es similar para todas las estaciones. Contemplando esto se puede utilizar un valor promedio como medida de fiabilidad del modelo. Por ejemplo el valor promedio es 0.577, con este valor se tiene una medida rápida del desempeño del modelo. Así se procedió a generar la Tabla 10, que muestra los promedios de las métricas de todas las estaciones de los contaminantes en estudio.

**Tabla 10** Promedios de los índices de concordancia y de las métricas de error craso normalizado y tendencia de error, del desempeño del modelo utilizando el inventario de emisiones original

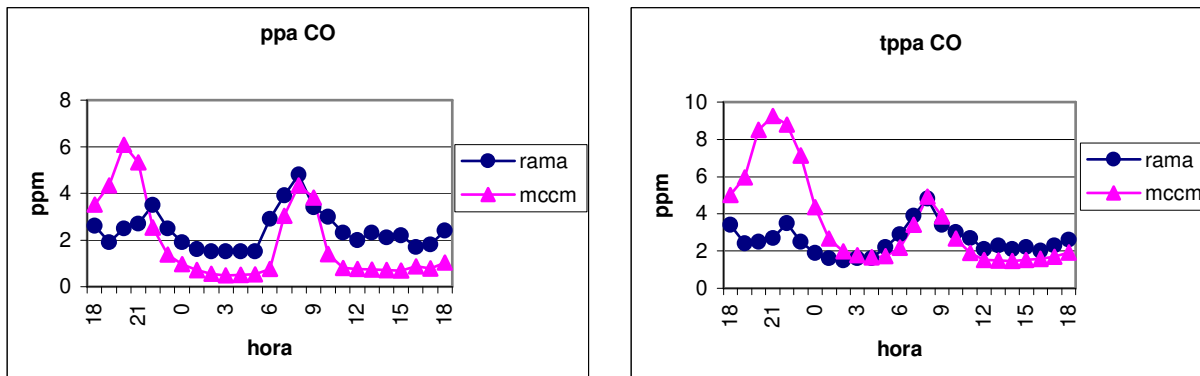
Parámetro	lc	Nge	Nb
CO	0.380	1.253	0.958
Ozono	0.577	0.809	-0.439
NO <sub>x</sub>	0.419	2.899	2.757
SO <sub>2</sub>	0.322	0.452	-0.283
NO <sub>2</sub>	0.265	1.166	1.024
PM <sub>10</sub>	0.448	0.564	-0.295

Como se puede observar el índice de concordancia mayor corresponde a la modelación de ozono, y el menor corresponde a bióxido de nitrógeno.

*Concentraciones máximas obtenidas al utilizar el inventario de emisiones original*







**Fig. 9** Concentraciones máximas alcanzadas por el modelo al utilizar el inventario de emisiones original.

Las gráficas de picos muestran el desempeño del modelo para predecir las concentraciones máximas, como se puede ver, el modelo emite resultados cercanos a las observaciones, siendo necesario la optimización del inventario de emisiones para que haya una alta exactitud de predicción de picos. La predicción de picos es muy importante ya que para el pronóstico se tomaran medidas de prevención de acuerdo a estos resultados.

**Tabla 11** Promedios de las evaluaciones de picos de todo el horario de modelación

Parámetro	TPPA	PPA
CO	0.388	-0.271
Ozono	-0.396	-0.568
NO <sub>x</sub>	1.482	0.371
SO <sub>2</sub>	0.791	-0.544
NO <sub>2</sub>	0.362	0.062

**Tabla 12** Concentraciones máximas alcanzadas de todo el horario de modelación y los valores de TPPA y PPA

Parámetro (ppm)	TPPA		PPA		
	RAMA	MCCM	tppa	MCCM ppa en sitio	
CO	4.8	4.9	0.027	4.346	-0.095
Ozono	0.13	0.055	-0.580	0.040	-0.696
NO <sub>x</sub>	0.447	0.313	-0.301	0.249	-0.442
SO <sub>2</sub>	0.011	0.015	0.385	0	-0.99
NO <sub>2</sub>	0.105	0.062	-0.412	0.053	-0.495

En la Tabla 12 se observan las concentraciones máximas alcanzadas para el día 16 de Abril de 2006 y sus respectivos valores de TPPA y PPA

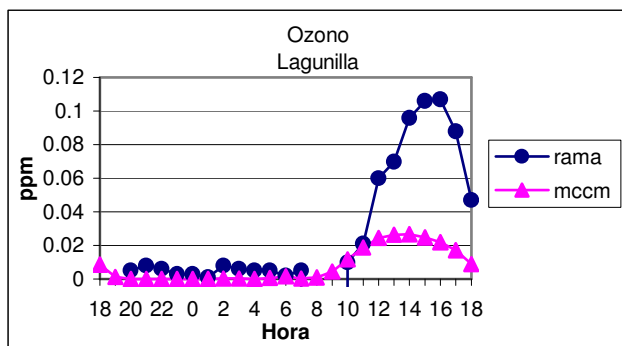
### Modelación inversa

En este apartado, para ejemplificar, se muestra el proceso de la modelación inversa que se efectuó para obtener mejores resultados del pronóstico de ozono. Para incrementar el nivel de acierto de la predicción de este contaminante primero se realizó la modelación inversa de óxidos de nitrógeno (se ajustaron las emisiones de NO y NO<sub>2</sub> del inventario de emisiones de acuerdo a las evaluaciones), una vez obtenidos los resultados de los óxidos de nitrógeno se procedió a ajustar las emisiones de los hidrocarburos con el fin de lograr una predicción fiable de ozono. Este tipo de ajuste a los hidrocarburos se puede realizar ya que en la literatura Foy (2006) concluye que existe una gran incertidumbre en los inventarios de emisiones de la Ciudad de México. Los hidrocarburos que se modificaron del inventario de emisiones están clasificados en especies, definidas de acuerdo al mecanismo fotoquímico RADM2 que utiliza el modelo, se muestran en la Tabla 13.

**Tabla 13** Especies de hidrocarburos que fueron modificadas en el inventario de emisiones

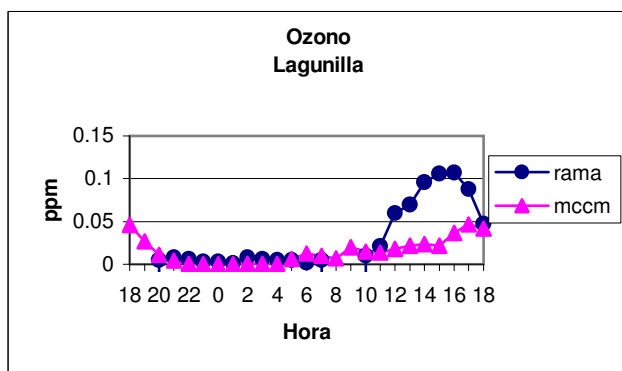
Especie RADM2	Definición	Numero de carbonos	Peso molecular
HC3	Alcanos, alcoholes, esteres y alquinos con OH con una constante de velocidad de reacción (298K, 1atm) entre 2.7E-13 y 3.4E-12	2.9	44
HC5	Alcanos, alcoholes, esteres y alquinos con OH con una constante de velocidad de reacción (298K, 1atm) entre 3.4E-12 y 6.8E-12	4.8	72
HC8	Alcanos, alcoholes, esteres y alquinos con OH con una constante de velocidad de reacción (298K, 1atm) mayor a 6.8E-12	7.9	114
KET	Ketonas	3.9	72
DCB	Dicarbonilos insaturados	4.2	87
ORA1	Ácido fórmico	1.0	46
ORA2	Ácido acético	2.0	60
TOL	Tolueno y compuestos aromáticos menos reactivos	7.1	92
XYL	Xileno y compuestos aromáticos más reactivos	8.9	106
ETH	Etano	2.0	30
OL2	Eteno	2.0	28
OLT	Alquenos terminales	3.8	42
OLI	Alquenos internos	5.0	68
CSL	Cresol y otros compuestos aromáticos sustituidos por grupo hidroxil	6.6	108
ALD	Acetaldehído y aldehídos más largos	2.4	44
HCHO	Formaldehído	1.0	30

***Tendencia evolutiva de la modelación inversa para ozono***



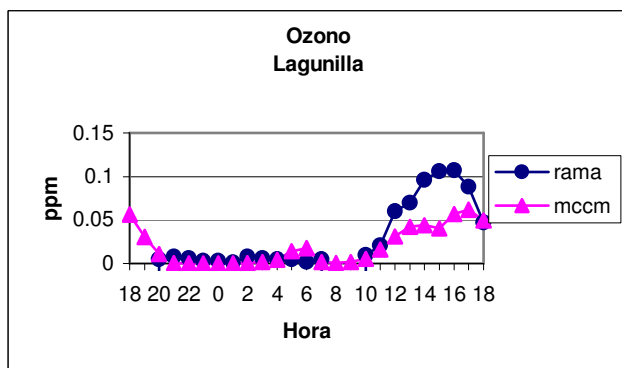
Original ozono

lc	0.5972
$\sigma_o$	0.0380
$\sigma_p$	0.0106
RMSD <sub>S</sub>	0.0366
RMSD <sub>U</sub>	0.0049
RMSD	0.0369
Nge	0.7735
Nb	-0.7581



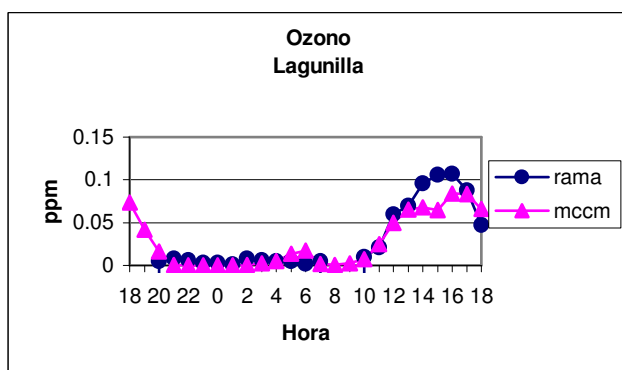
Versión 1

lc	0.6469
$\sigma_o$	0.0380
$\sigma_p$	0.0139
RMSD <sub>S</sub>	0.0324
RMSD <sub>U</sub>	0.0084
RMSD	0.0335
Nge	0.9353
Nb	-0.1498



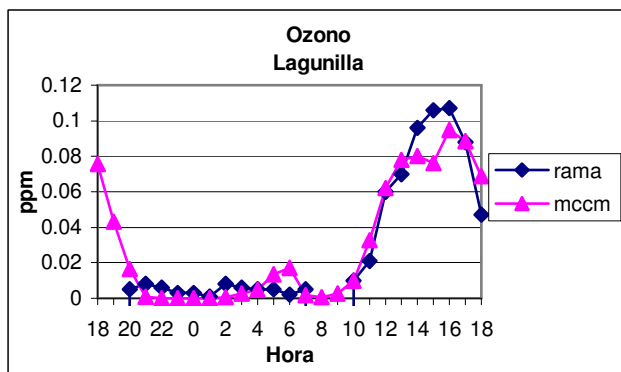
Versión 2

lc	0.8303
$\sigma_o$	0.0380
$\sigma_p$	0.0209
RMSD <sub>S</sub>	0.0227
RMSD <sub>U</sub>	0.0086
RMSD	0.0243
Nge	1.0381
Nb	0.0036



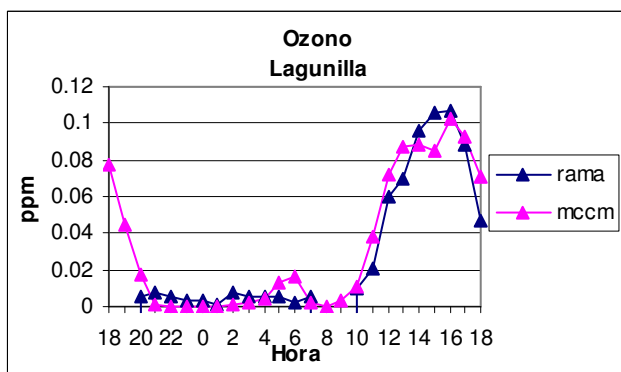
Versión 3

lc	0.9569
$\sigma_o$	0.0380
$\sigma_p$	0.0307
RMSD <sub>S</sub>	0.0100
RMSD <sub>U</sub>	0.0100
RMSD	0.0141
Nge	0.9880
Nb	0.1822



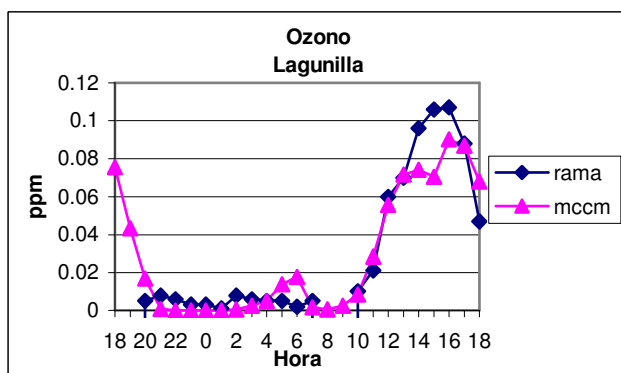
Versión 4

lc	0.9764
$\sigma_o$	0.0380
$\sigma_p$	0.0349
RMSD <sub>S</sub>	0.0046
RMSD <sub>U</sub>	0.0101
RMSD	0.0111
Nge	0.9679
Nb	0.2403



Versión 5

lc	0.9793
$\sigma_o$	0.0380
$\sigma_p$	0.0382
RMSD <sub>S</sub>	0.0025
RMSD <sub>U</sub>	0.0106
RMSD	0.0109
Nge	0.9914
Nb	0.2910



Versión 6

lc	0.9692
$\sigma_o$	0.0380
$\sigma_p$	0.0330
RMSD <sub>S</sub>	0.0070
RMSD <sub>U</sub>	0.0101
RMSD	0.0123
Nge	0.9899
Nb	0.2281

Fig. 10 Representación evolutiva de la modelación inversa de ozono.

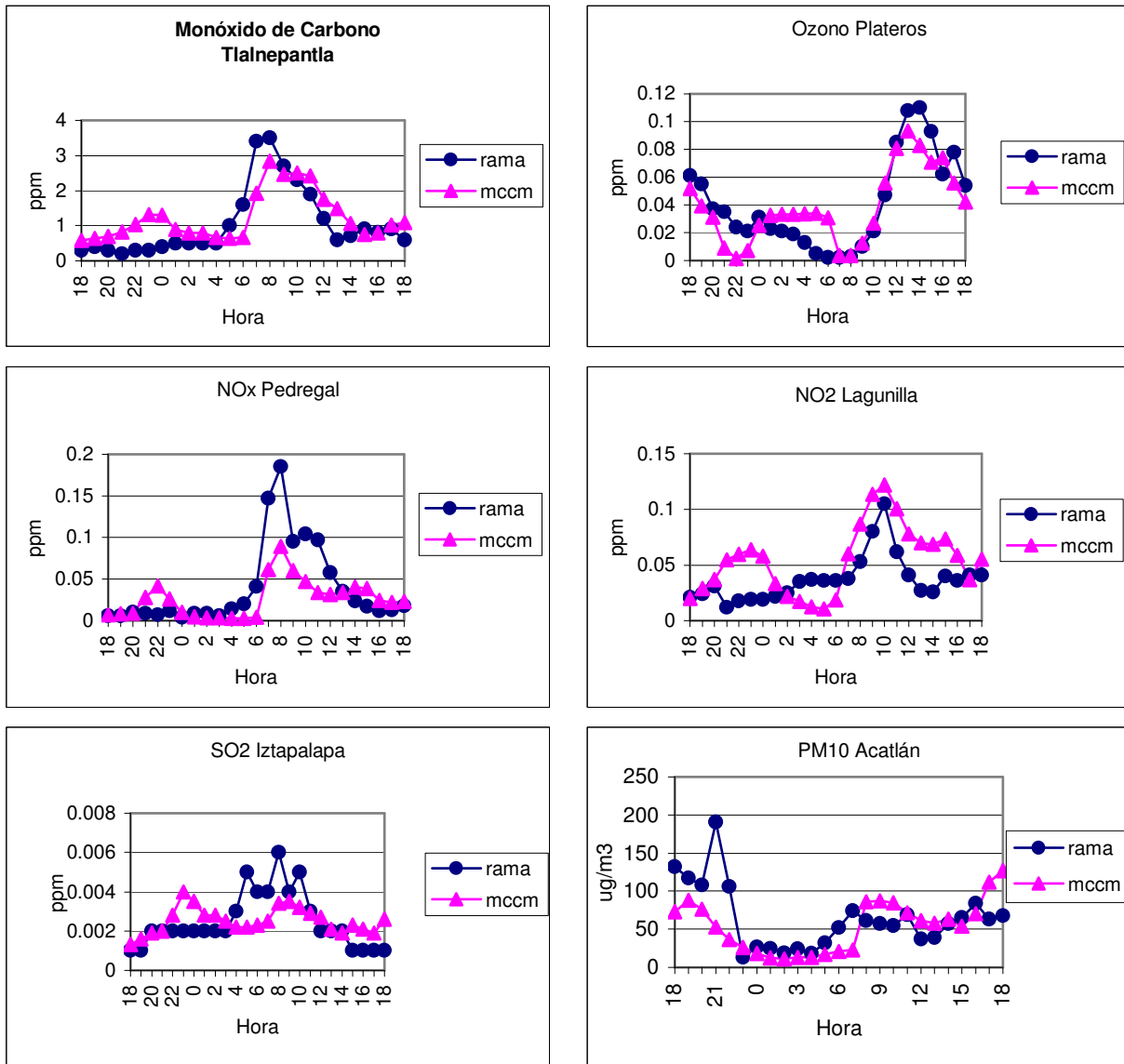
Para obtener la Versión 1, se incrementaron las emisiones de NO en el triple de lo inventariado de 9 a 14 horas. La Versión 2 fue el producto del ajuste las emisiones de los óxidos de nitrógeno, se disminuyeron a un tercio las de NO en un horario de las 22 a las 4 horas y se incrementaron las de NO<sub>2</sub> en un 65% en el horario de las 9 a las 11 horas. La Versión 3 fue el resultado de incrementar las emisiones de los hidrocarburos a lo doble, incluido el formaldehído. La Versión 4 se obtuvo al incrementar las emisiones de hidrocarburos a siete veces lo original. Para alcanzar los resultados de la Versión 5 se incrementaron las emisiones de hidrocarburos a 9 veces lo inventariado, así se pudo observar que no era necesario un incremento de tal magnitud, finalmente se utilizaron los factores que se muestran en la Tabla 14, se procedió a incrementar en un 50% más las emisiones de hidrocarburos para las zona sur, esto se aplicó de acuerdo a los resultados obtenidos de la modificación anterior. En la Versión 6 se disminuyó la concentración de

formaldehído con la finalidad de atrasar el inicio del pico de ozono, ya que el formaldehído influye en el inicio de la aparición del pico de ozono. Los factores de los incrementos de los hidrocarburos surgieron de la corrección de unidades de la siguiente forma: los pesos moleculares de la especie en cuestión divididos entre el peso molecular del carbono, esto para referir las emisiones a base carbono (partes por millón base carbono).

**Tabla 14** Factores finales del ajuste de las emisiones de los hidrocarburos

<b>Especie RADM2</b>	<b>Factor de ajuste al norte</b>	<b>Factor de ajuste al sur</b>
<b>HC3</b>	3.6	5.4
<b>HC5</b>	6	9
<b>HC8</b>	9.5	14.25
<b>KET</b>	6	9
<b>DCB</b>	7.25	10.8
<b>ORA1</b>	3.8	5.7
<b>ORA2</b>	5	7.5
<b>TOL</b>	7.6	11.4
<b>XYL</b>	8.8	13.2
<b>ETH</b>	2.5	3.75
<b>OL2</b>	2.3	3.45
<b>OLT</b>	3.5	5.25
<b>OLI</b>	5.6	8.4
<b>CSL</b>	9	13.5
<b>ALD</b>	3.7	5.55

**Resultados del modelo MCCM utilizando el inventario de emisiones optimizado.**



**Fig. 11** Desempeño del modelo al utilizar el inventario de emisiones optimizado.

**Tabla 15** Análisis estadístico de las modelaciones utilizando el inventario de emisiones optimizado

<b>Parámetro</b>	<b>CO</b>	<b>Ozono</b>	<b>NO<sub>x</sub></b>	<b>NO<sub>2</sub></b>	<b>SO<sub>2</sub></b>	<b>PM<sub>10</sub></b>
Estación	TLA	PLA	PED	LAG	UIZ	EAC
lc	0.859	0.916	0.743	0.709	0.563	0.615
$\sigma_o$	0.9492	0.0325	0.0479	0.0201	0.0014	40.863
$\sigma_p$	0.6710	0.0259	0.0218	0.0303	0.0006	32.987
RMSD <sub>S</sub>	0.4468	0.0102	0.0324	0.0174	0.0011	28.852
RMSD <sub>U</sub>	0.3953	0.0127	0.0126	0.0228	0.0006	30.051
RMSD	0.5966	0.0163	0.0348	0.0287	0.0012	41.660
Nge	0.878	1.181	0.867	0.886	0.477	0.474
Nb	0.729	0.838	0.285	0.677	0.263	-0.039

De acuerdo a la Tabla 15 el monóxido de carbono, ozono, bióxido de nitrógeno, óxidos de nitrógeno y PM<sub>10</sub> obtuvieron altos índices de concordancia, para bióxido de azufre se consiguió un índice de concordancia de 0.563

Para el caso del monóxido de carbono en la estación Tlalnepantla se tuvo un índice de concordancia de 0.859, la distribución de los datos son similares ya que los datos observados y los datos generados por el modelo muestran desviaciones estándar muy parecidas.

En la estación Plateros el ozono alcanzó un índice de concordancia de 0.916 con poca diferencia de desviaciones estándar de los datos observados y los datos de modelación siendo estos 0.3254 y 0.2590 respectivamente.

Para óxidos de nitrógeno de la estación Pedregal se obtuvo un índice de concordancia de 0.743, desviaciones estándar de 0.479 para los datos observados y 0.21 para los datos generados por el modelo MCCM.

En la modelación de NO<sub>2</sub> en la estación Lagunilla se obtuvo un índice de concordancia de 0.708, esto indica una modelación cercana a las mediciones. En la estación Iztapalapa la modelación del SO<sub>2</sub> obtuvo un índice de concordancia de 0.563

La modelación de PM<sub>10</sub> dio resultados que se apegaron a los valores de las mediciones, esto se observa ya que el índice de concordancia alcanzado fue de 0.615 y además las desviaciones estándar difieren poco entre si

***Análisis estadístico del desempeño de la modelación de ozono de todas las estaciones utilizando el inventario de emisiones optimizado***

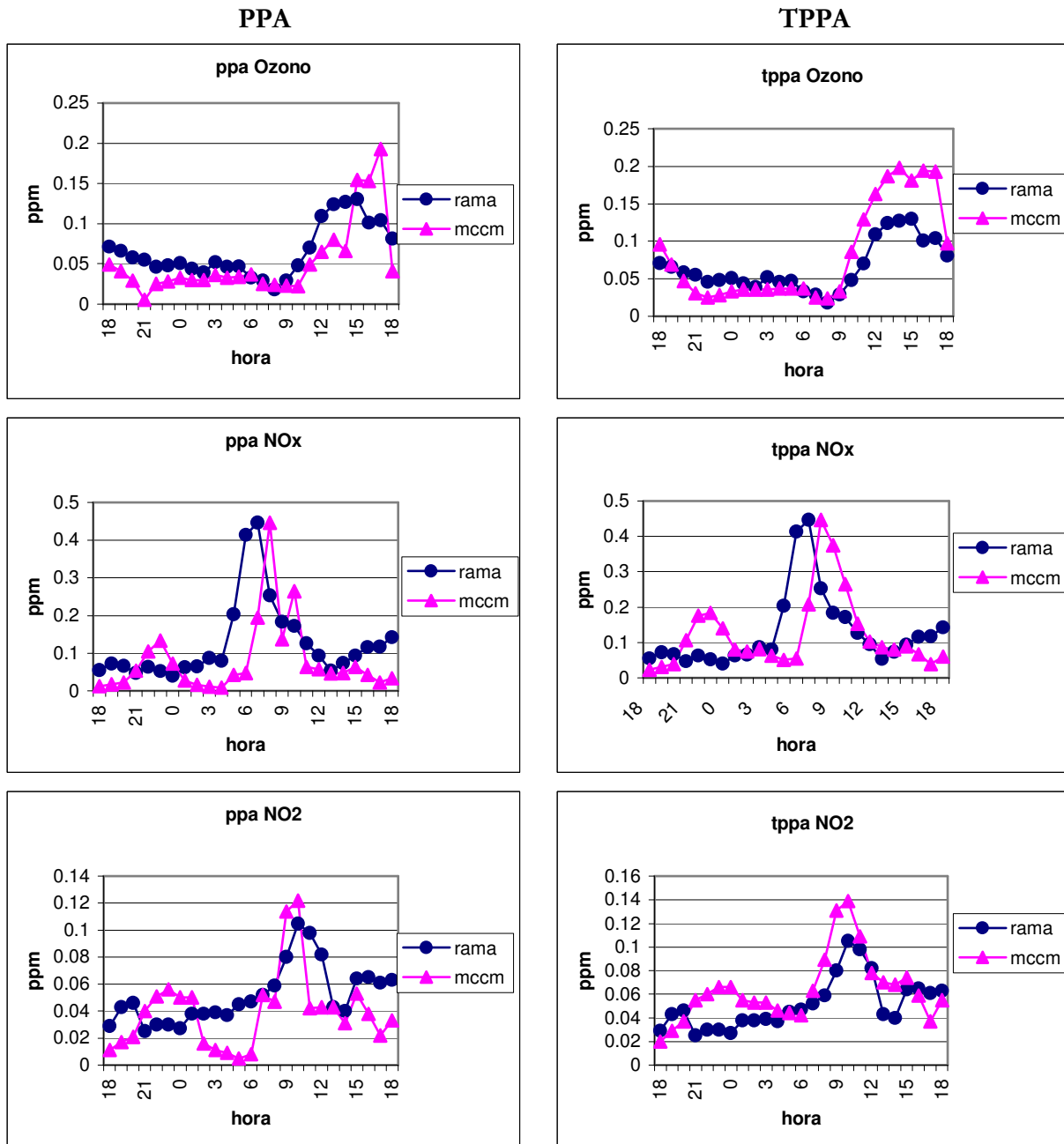
**Tabla 16** Análisis estadístico del desempeño de la modelación de ozono al utilizar el inventario de emisiones optimizado

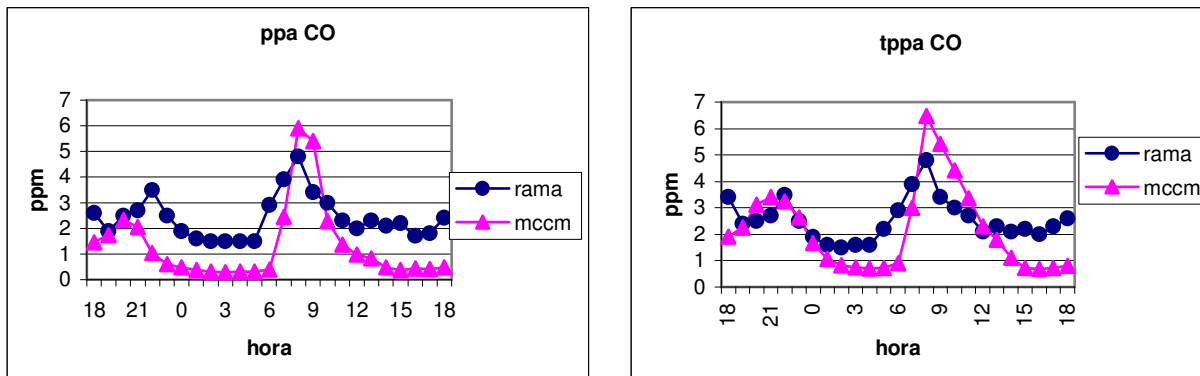
<b>Estación</b>	<b>lc</b>	<b><math>\sigma_o</math></b>	<b><math>\sigma_p</math></b>	<b>RMSD<sub>s</sub></b>	<b>RMSD<sub>u</sub></b>	<b>RMSD</b>	<b>Nge</b>	<b>Nb</b>
TAC	0.877	0.033	0.047	0.010	0.025	0.027	1.656	1.280
EAC	0.853	0.031	0.052	0.018	0.026	0.031	0.719	0.385
SAG	0.895	0.034	0.053	0.021	0.019	0.028	1.167	0.915
TLA	0.776	0.035	0.076	0.038	0.037	0.053	1.176	0.533
XAL	0.869	0.031	0.056	0.022	0.022	0.031	1.010	0.492
MER	0.851	0.016	0.029	0.015	0.010	0.018	0.238	0.085
PED	0.774	0.036	0.018	0.024	0.010	0.026	1.177	0.724
CES	0.852	0.026	0.019	0.013	0.011	0.017	0.930	0.493
PLA	0.917	0.033	0.026	0.010	0.013	0.016	1.182	0.838
HAN	0.884	0.024	0.033	0.010	0.016	0.019	1.635	1.255
CUA	0.920	0.020	0.022	0.008	0.009	0.012	0.241	-0.180
TPN	0.684	0.020	0.010	0.019	0.006	0.020	0.269	-0.212
CHA	0.835	0.022	0.030	0.004	0.020	0.020	0.482	0.030
TAH	0.816	0.015	0.011	0.008	0.008	0.011	0.252	0.008
UIZ	0.849	0.031	0.023	0.016	0.013	0.020	2.428	1.891
TAX	0.733	0.014	0.022	0.014	0.014	0.020	2.140	1.975
LAG	0.907	0.031	0.043	0.009	0.020	0.022	1.766	1.344
AZC	0.878	0.037	0.061	0.020	0.027	0.034	0.799	0.331

En la Tabla 16 se puede observar que el desempeño de los resultados del modelo para la predicción de ozono se asemeja a los datos de las mediciones de la RAMA ya que los índices de concordancia son altos (cerca de uno), las desviaciones estándar de los datos observados y de los datos predichos son parecidas, por lo tanto las distribuciones de los datos son similares.



*Concentraciones máximas obtenidas al utilizar el inventario de emisiones optimizado*





**Fig. 12** Concentraciones máximas alcanzadas por el modelo al utilizar el inventario de emisiones optimizado.

**Tabla 17** Promedios de las evaluaciones de los picos para el horario de modelación

Parámetro	TPPA	PPA
CO	-0.208	-0.524
Ozono	0.141	-0.227
NO <sub>x</sub>	0.246	-0.285
SO <sub>2</sub>	3.113	0.315
NO <sub>2</sub>	0.316	-0.191
PM <sub>10</sub>	-0.312	-0.439

Las gráficas de la Figura 12 muestran que con el nuevo inventario de emisiones se obtienen valores que siguen el comportamiento de las concentraciones máximas reportadas por la RAMA, así como también se observa que el modelo en algunos casos logra una ligera sobreestimación de los valores. La predicción de picos de óxidos de nitrógeno muestra un defasamiento de 2 horas aproximadamente. Por otro lado de acuerdo a la Tabla 17 la modelación de ozono reporta una leve sobreestimación de apenas del 14% al medir el TPPA de todo el horario de modelación.

**Tabla 18** Valores máximos alcanzados y la evaluación de los picos

Parámetro	TPPA		PPA		PPA
	RAMA	MCCM	TPPA	MCCM	
CO	4.8	6.465	0.351	5.905	0.23
Ozono	0.13	0.181	0.389	0.154	0.184
NO <sub>x</sub>	0.447	0.208	-0.535	0.194	-0.566
SO <sub>2</sub>	0.011	0.034	2.106	0.004	-0.677
NO <sub>2</sub>	0.105	0.139	0.322	0.122	0.16
PM <sub>10</sub>	649	69.084	-0.894	31.636	-0.951

Unidades: ppm para los gases y  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  para PM<sub>10</sub>

En la Tabla 18 se observan las concentraciones máximas de los contaminantes, de acuerdo a estos datos el modelo da un pronóstico fiable, ya que los valores del MCCM

no difieren en gran medida de los reportados por la RAMA, esto es muy importante ya que se trata de valores que pudieran ser extremos al ser concentraciones máximas.

**Tabla 19** Promedios de los índices de concordancia y las métricas del error craso normalizado y tendencia del error normalizado del desempeño del modelo al utilizar el inventario de emisiones optimizado

<b>Parámetro</b>	<b>Ic</b>	<b>Nge</b>	<b>Nb</b>
CO	0.6386	0.6468	0.1930
Ozono	0.8395	1.1377	0.7385
NO <sub>x</sub>	0.7790	0.9532	0.5790
SO <sub>2</sub>	0.4638	0.7265	0.5586
NO <sub>2</sub>	0.6331	0.6743	0.3549
PM <sub>10</sub>	0.4355	0.6903	0.1118

De acuerdo a la Tabla 19 se obtuvieron altos índices de concordancia y en general bajos errores normalizados, mostrando una leve sobreestimación, ya que las tendencias de los errores fueron positivas.

### Evaluación del inventario de emisiones optimizado

Para la evaluación del inventario de emisiones optimizado se compararon los resultados del modelo utilizando el inventario de emisiones original y el optimizado. Los datos son del día 16 de Abril de 2006.

#### *Evaluación del desempeño de Ozono en la estación Plateros*

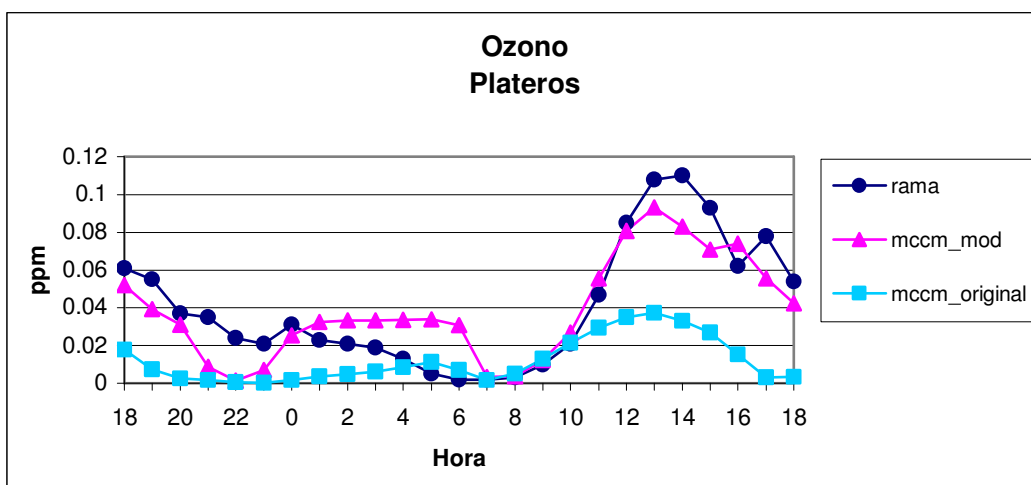


Fig. 13 Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo de ozono en la estación Plateros.

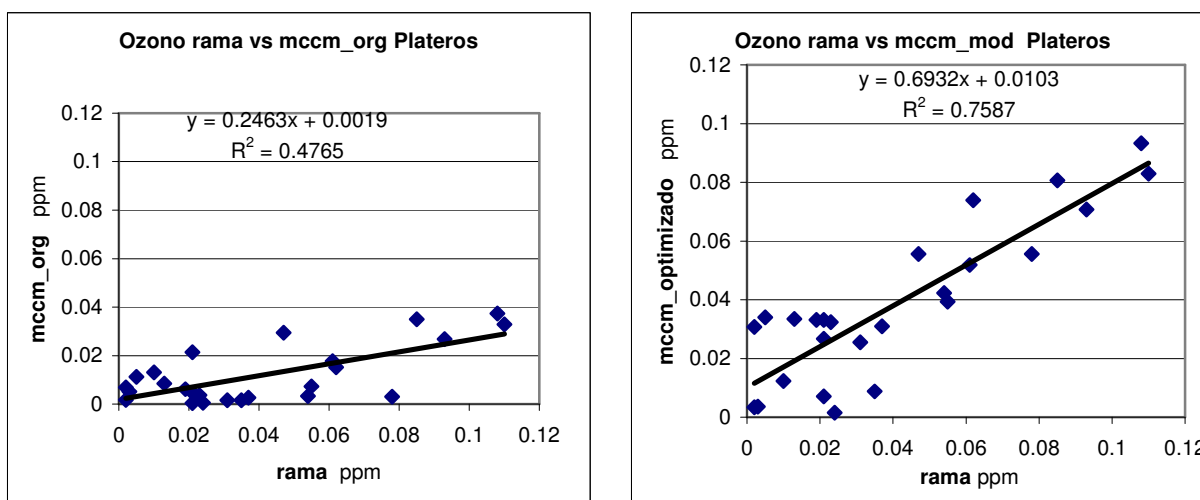


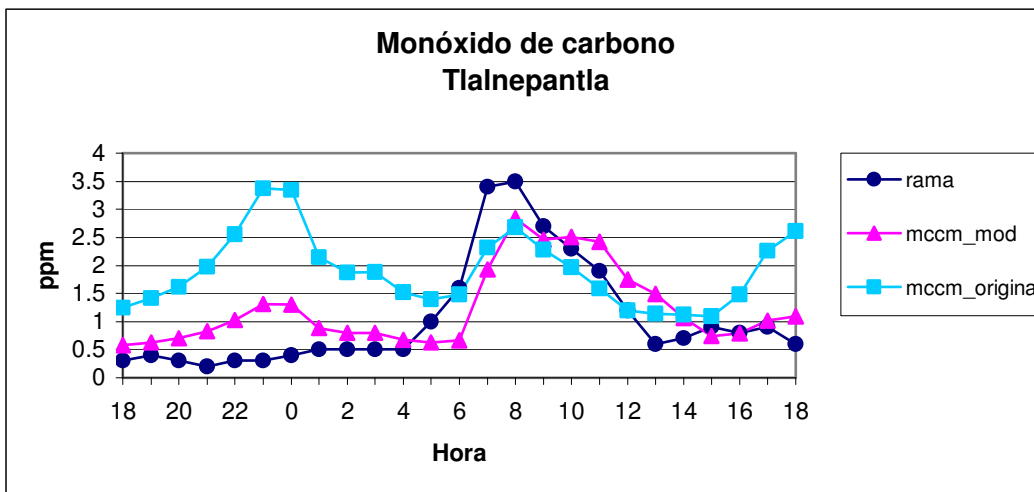
Fig. 14 Diagramas de dispersión de los resultados de ozono en la estación Plateros, correlacionados con las mediciones de la RAMA.

**Tabla 20** Análisis estadístico de las modelaciones de ozono en la estación Plateros

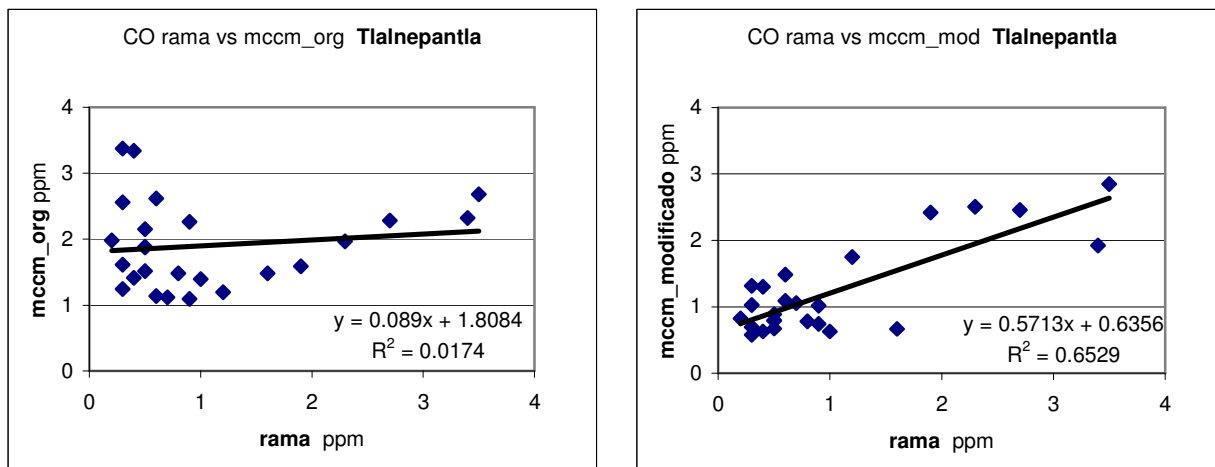
Parámetro	Ozono	
	Original	Optimizado
Inventario	Original	Optimizado
lc	0.5547	0.9169
$\sigma_o$	0.0325	0.0325
$\sigma_p$	0.0116	0.0259
RMSD <sub>S</sub>	0.0379	0.0102
RMSD <sub>U</sub>	0.0084	0.0127
RMSD	0.0388	0.0163
Nge	0.7850	1.1818
Nb	-0.3996	0.8384

Los datos obtenidos al utilizar el inventario de emisiones optimizado muestran un índice de concordancia alto y una desviación estándar parecida a la de las mediciones, además hubo una disminución del RMSD.

*Evaluación del desempeño de monóxido de carbono en la estación Tlalnepantla*



**Fig. 15** Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo para monóxido de carbono en la estación Tlalnepantla.



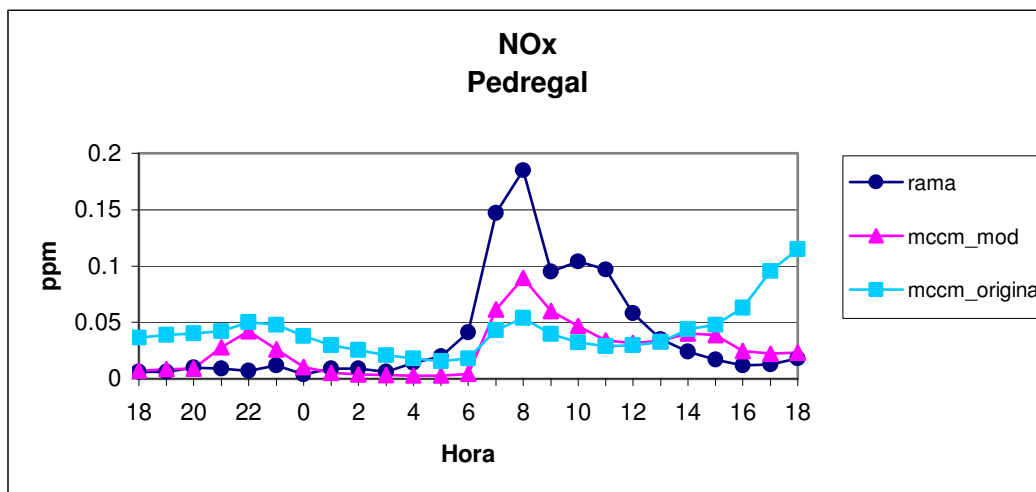
**Fig. 16** Diagramas de dispersión de los resultados de CO en la estación Tlalnepantla, correlacionados con las mediciones de la RAMA.

**Tabla 21** Análisis estadístico de las modelaciones de monóxido de carbono en la estación Tlalnepantla

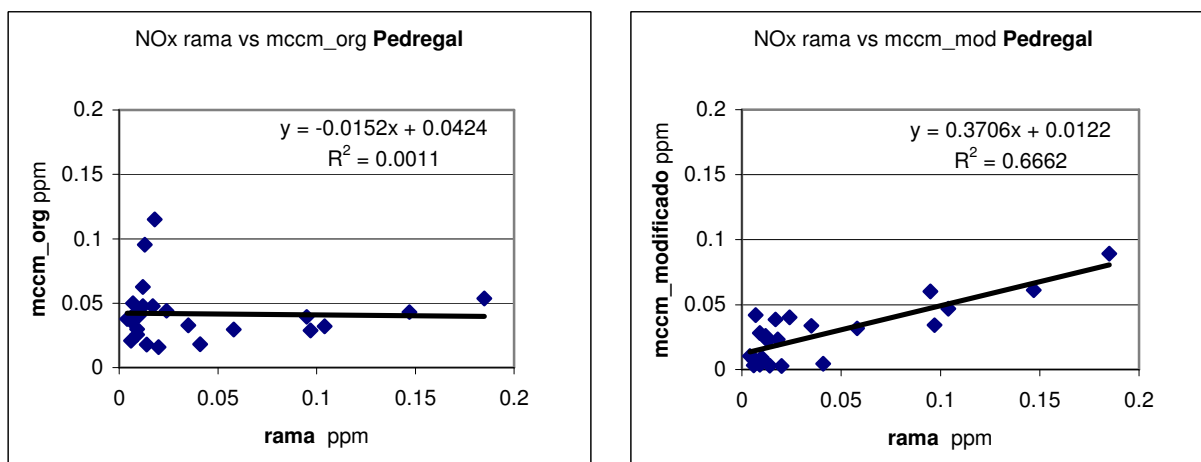
Parámetro	Monóxido de carbono	
	Original	Optimizado
Inventario		
lc	0.4804	0.8599
$\sigma_o$	0.9492	0.9492
$\sigma_p$	0.6405	0.6710
RMSD <sub>s</sub>	1.2125	0.4468
RMSD <sub>U</sub>	0.6349	0.3953
RMSD	1.3687	0.5966
Nge	2.5539	0.8783
Nb	2.4662	0.7298

La modelación de monóxido de carbono al utilizar el inventario de emisiones optimizado mejoró, ya que se logró un comportamiento horario muy parecido al mostrado por los valores observados, se incrementó el índice de concordancia, la raíz cuadrática media de la desviación y los errores normalizados disminuyeron.

**Evaluación del desempeño de los óxidos de nitrógeno en la estación Pedregal**



**Fig. 17** Gráfica horaria comparativa del desempeño de NO<sub>x</sub> en la estación Pedregal.



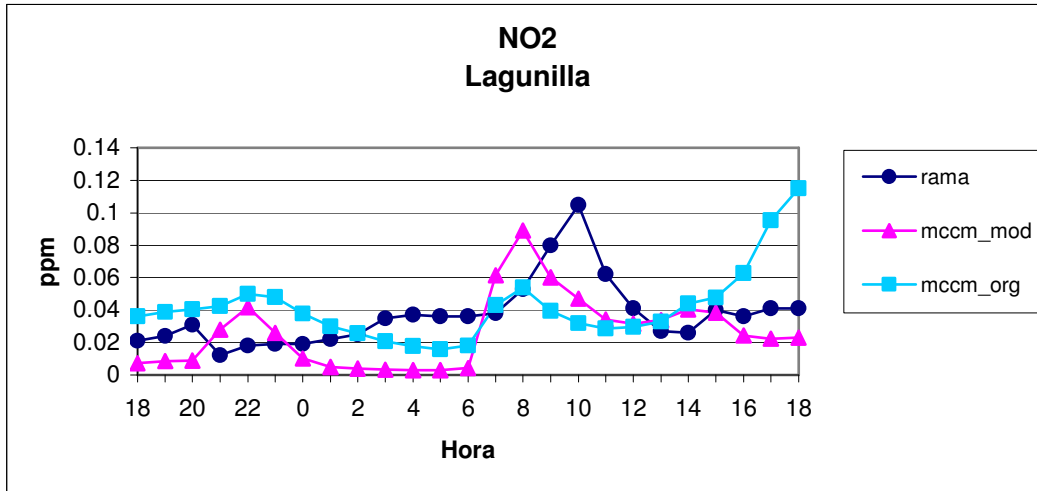
**Fig. 18** Diagramas de dispersión de los resultados de NO<sub>x</sub> en la estación Pedregal, correlacionados con las mediciones de la RAMA.

**Tabla 22** Análisis estadístico de las modelaciones de NO<sub>x</sub> en la estación Pedregal.

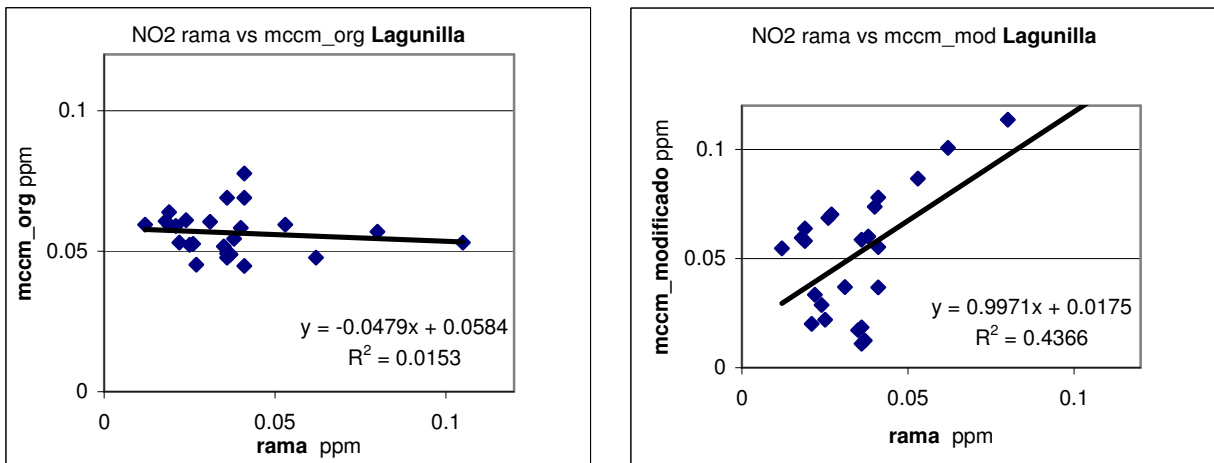
Parámetro	Óxidos de nitrógeno	
	Original	Optimizado
Inventario	0.2208	0.7431
lc	0.2208	0.7431
σ <sub>o</sub>	0.0479	0.0479
σ <sub>p</sub>	0.0221	0.0218
RMSD <sub>s</sub>	0.0488	0.0324
RMSD <sub>U</sub>	0.0221	0.0126
RMSD	0.0535	0.0348
Nge	2.6002	0.8676
Nb	2.2221	0.2857

La predicción de los óxidos de nitrógeno utilizando el inventario de emisiones optimizado logró un incremento del índice de concordancia, los errores normalizados disminuyeron al igual que la raíz cuadrática media de la desviación.

**Evaluación del desempeño de NO<sub>2</sub> en la estación Lagunilla**



**Fig. 19** Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo para NO<sub>2</sub> en la estación Lagunilla.



**Fig. 20** Diagramas de dispersión de los resultados de NO<sub>2</sub> en la estación Lagunilla, correlacionados con las mediciones de la RAMA.

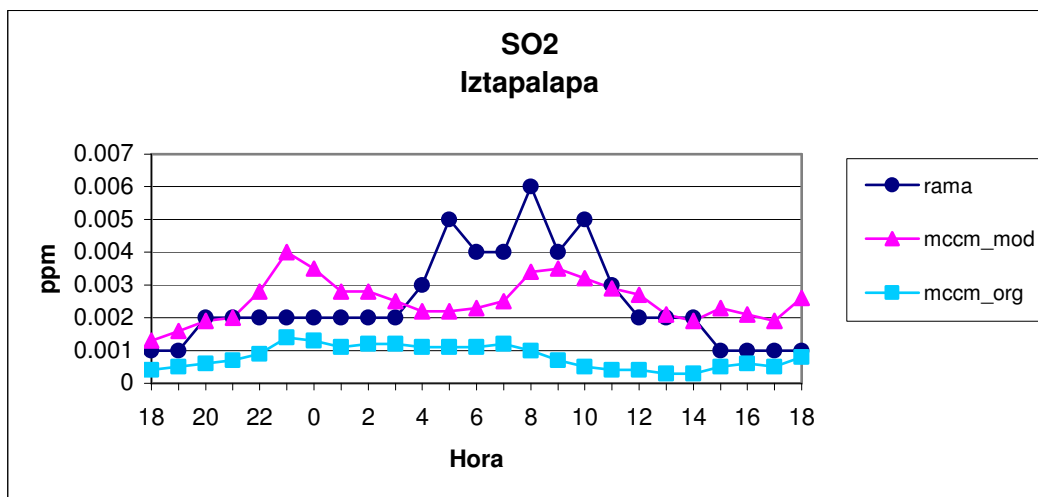


**Tabla 23** Análisis estadístico de las modelaciones de NO<sub>2</sub> en la estación Lagunilla

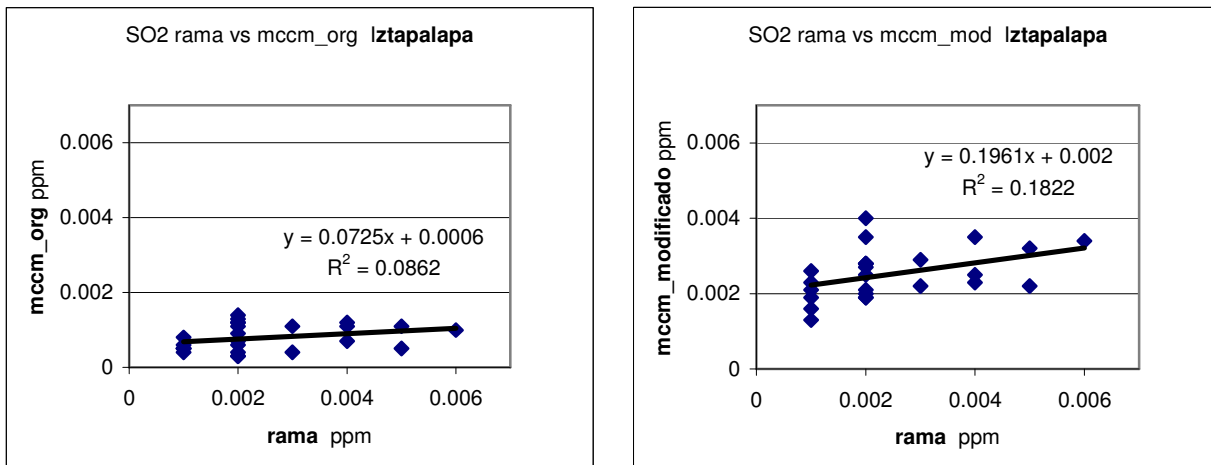
Parámetro	Bióxido de nitrógeno	
	Original	Optimizado
Inventario	Original	Optimizado
lc	0.3494	0.7089
$\sigma_o$	0.0201	0.0201
$\sigma_p$	0.0077	0.0303
RMSD <sub>S</sub>	0.0287	0.0173
RMSD <sub>U</sub>	0.0077	0.0227
RMSD	0.0297	0.0286
Nge	1.0161	0.8866
Nb	0.9351	0.6775

De acuerdo a la Tabla 23 con el nuevo inventario de emisiones aumentó el índice de concordancia, y se disminuyeron los errores normalizados y hay mayor similitud de las desviaciones estándar

*Evaluación del desempeño de SO<sub>2</sub> en la estación Iztapalapa.*



**Fig. 21** Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo para SO<sub>2</sub> en la estación Iztapalapa.



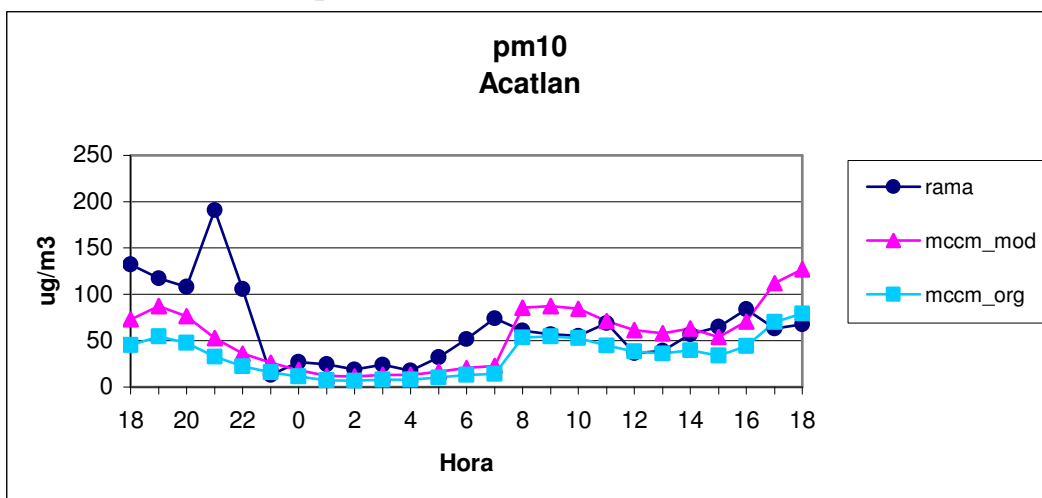
**Fig. 22** Diagramas de dispersión de los resultados de SO<sub>2</sub> en la estación Iztapalapa, correlacionados con las mediciones de la RAMA.

**Tabla 24** Análisis estadístico de las modelaciones de SO<sub>2</sub> en la estación Iztapalapa

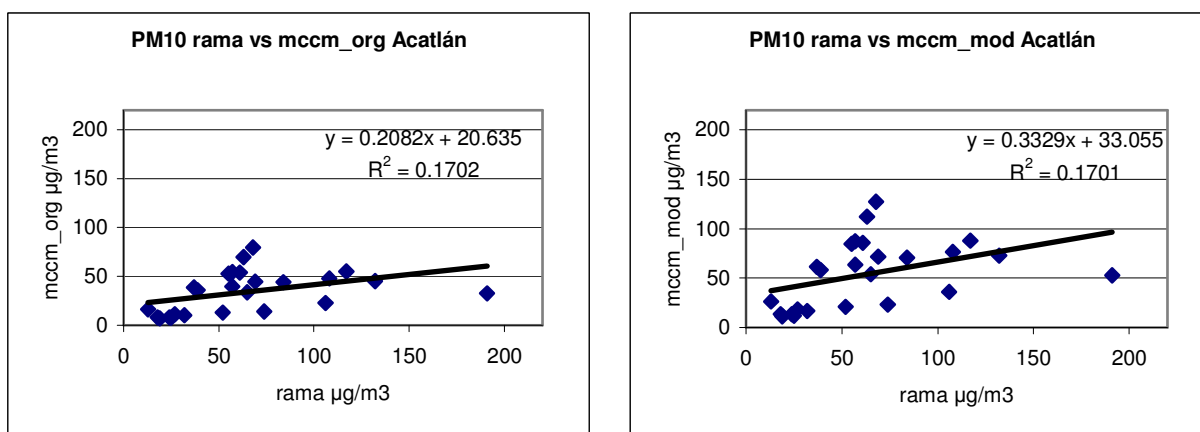
Parámetro	SO <sub>2</sub>	
	Original	Optimizado
Inventario	Original	Optimizado
lc	0.4708	0.5638
σ <sub>o</sub>	0.0014	0.0014
σ <sub>p</sub>	0.0003	0.0006
RMSDS	0.0021	0.0011
RMSDU	0.0003	0.0006
RMSD	0.0022	0.0012
Nge	0.6125	0.4773
Nb	-0.6125	0.2633

Con este nuevo inventario de emisiones el SO<sub>2</sub> fue mejor modelado ya que consiguió incrementar el índice de concordancia, se disminuyeron los errores normalizados y de acuerdo a la Figura 21 se ajustó el comportamiento horario.

**Evaluación del desempeño de PM<sub>10</sub> en la estación Acatlán.**



**Fig. 23** Gráfica horaria comparativa del desempeño del modelo para PM<sub>10</sub> en la estación Acatlán.



**Fig. 24** Diagramas de dispersión de los resultados de PM<sub>10</sub> en la estación Acatlán, correlacionados con las mediciones de la RAMA.

**Tabla 25** Análisis estadístico de las modelaciones de PM<sub>10</sub> en la estación Acatlán

Parámetro	PM <sub>10</sub>	
	Original	Optimizado
Inventario	Original	Optimizado
lc	0.555	0.615
σ <sub>o</sub>	40.863	40.863
σ <sub>p</sub>	20.626	32.987
RMSD <sub>S</sub>	43.998	28.852
RMSD <sub>U</sub>	18.789	30.051
RMSD	47.842	41.660
Nge	0.446	0.474
Nb	-0.400	-0.039

Los resultados de PM<sub>10</sub> al utilizar el inventario de emisiones optimizado se acercaron más a los datos observados que cuando el modelo utilizó el inventario de emisiones original, con la aplicación del inventario de emisiones optimizado el índice de concordancia aumentó y la diferencia de las desviaciones estándar de los datos medidos y de los predichos disminuyó.

### Promedios de las métricas estadísticas: Ic, Nge y Nb

Las siguientes tablas muestran los promedios de todas las estaciones del índice de concordancia, error craso normalizado y tendencia del error normalizado, para el día 16 de Abril de 2006.

**Tabla 26** Comparación de los promedios de los índices de concordancia

Parámetro	Ic	Ic	Modificación
	Inventario original	Inventario modificado	%
CO	0.380	0.638	68
Ozono	0.577	0.839	45
NO <sub>x</sub>	0.419	0.778	85
SO <sub>2</sub>	0.322	0.463	43
NO <sub>2</sub>	0.265	0.633	138
PM <sub>10</sub>	0.448	0.435	-2.8

En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** se resumen las mejoras que se obtuvieron al utilizar el inventario de emisiones optimizado para el día 16 de Abril de 2006, se ven las ganancias de los índices de concordancia, destacando los óxidos de nitrógeno, el bióxido de nitrógeno y el monóxido de carbono, la modelación de ozono alcanzó un índice de concordancia de 0.839, lo cual indica que es la especie que ofrece los resultados que mejor se apegan a los datos de las mediciones, esto se logró porque durante el proceso de la modelación inversa se persiguieron resultados fiables del pronóstico de ozono, ya que frecuentemente sobrepasa la norma de la calidad del aire.

Se puede apreciar en la Tabla 26 que el promedio del índice de concordancia de la modelación de SO<sub>2</sub> al utilizar el inventario de emisiones optimizado incrementó en un 43% en relación al obtenido utilizando el inventario de emisiones original. El desempeño de la modelación de PM<sub>10</sub> fue menor al utilizar el inventario de emisiones optimizado que utilizando el inventario de emisiones original. Este desempeño fue debido principalmente a los problemas de la predicción meteorológica. Cabe mencionar que para otros días la modelación de PM<sub>10</sub> obtuvo un promedio del índice de concordancia mayor al utilizar el inventario de emisiones optimizado, esto se puede observar en la Figura 30, donde el desempeño del modelo alcanzó un promedio del índice de concordancia de hasta 0.68

**Tabla 27** Comparación de los promedios del error craso normalizado

Parámetro	Nge	
	Inventario original	Inventario modificado
CO	1.253	0.646
Ozono	0.809	1.137
NO <sub>x</sub>	2.899	0.953
SO <sub>2</sub>	0.452	0.726
NO <sub>2</sub>	1.166	0.674
PM <sub>10</sub>	0.564	0.690

**Tabla 28** Comparación de los promedios de Nb

Parámetro	Nb	
	Inventario original	Inventario modificado
CO	0.958	0.192
Ozono	-0.439	0.738
NO <sub>x</sub>	2.757	0.579
SO <sub>2</sub>	-0.283	0.558
NO <sub>2</sub>	1.024	0.354
PM <sub>10</sub>	-0.295	0.111

En las Tablas 27 y 28 se puede observar que el modelo al utilizar el inventario de emisiones original generó datos subestimados, y que los resultados al utilizar el nuevo inventario fueron levemente sobreestimados, se notándose tendencias de error mínimas.

**Tabla 29** Comparación de los promedios de los picos de todo el horario de la métrica TPPA

Parámetro	TPPA	
	Inventario original	Inventario modificado
CO	0.25	-0.29
Ozono	-0.39	0.14
NO <sub>x</sub>	1.48	0.24
SO <sub>2</sub>	0.79	3.11
NO <sub>2</sub>	0.36	0.31
PM <sub>10</sub>	-0.57	-0.31

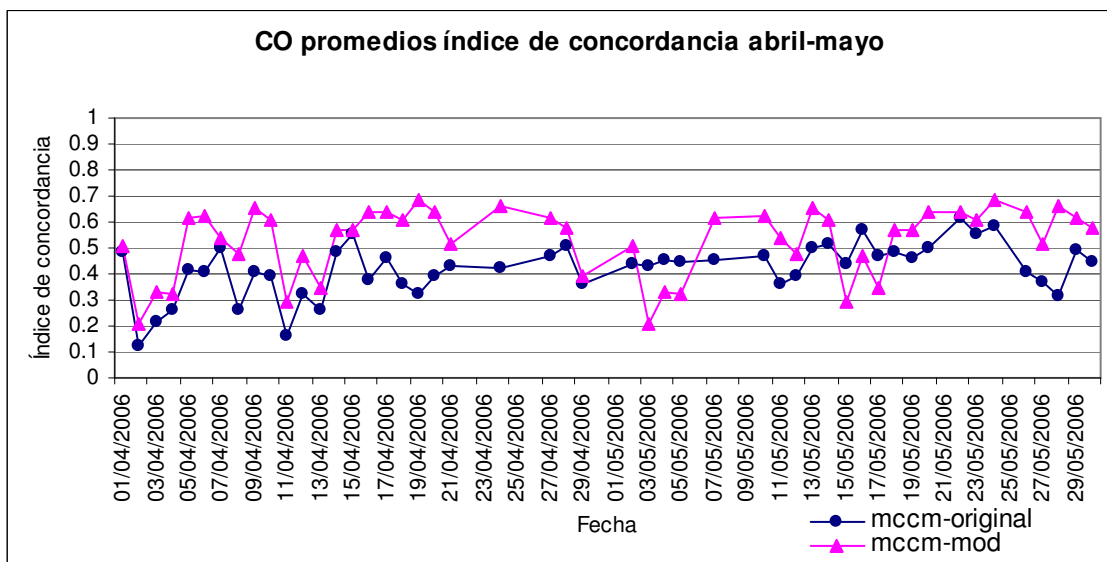
**Tabla 30** Comparación de los promedios de los picos de todo el horario de la métrica PPA

Parámetro	PPA	
	Inventario original	Inventario de modificado
CO	-0.58	-0.32
Ozono	-0.22	-0.56
NO <sub>x</sub>	-0.28	0.37
SO <sub>2</sub>	0.31	-0.54
NO <sub>2</sub>	-0.19	0.06
PM <sub>10</sub>	-0.43	-0.65

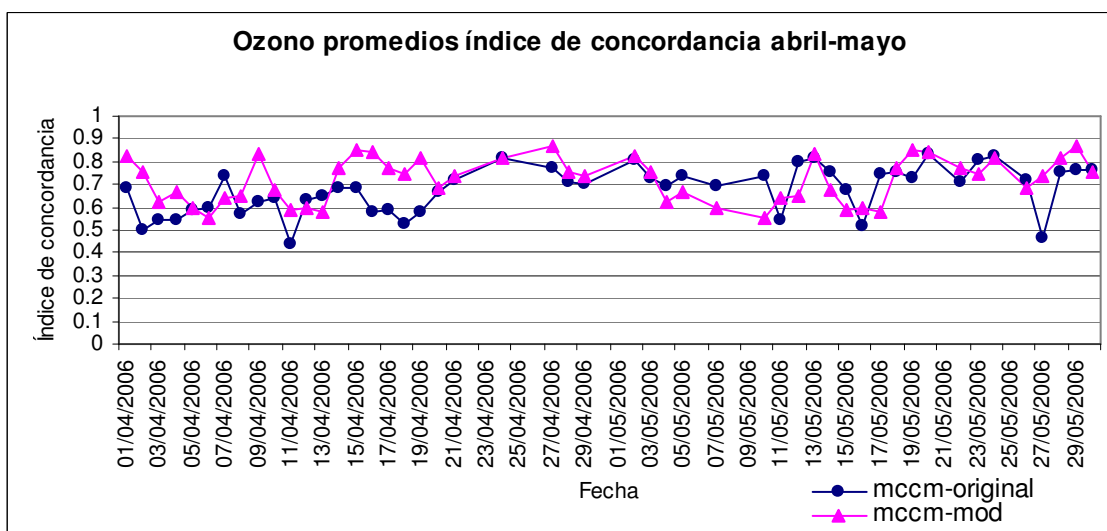
Las Tablas 29 y 30 muestran los valores de TPPA y PPA respectivamente, los cuales indican una mejor predicción de las concentraciones pico cuando el modelo utiliza el inventario de emisiones optimizado.

**Comparación del desempeño del modelo al utilizar ambos inventarios de emisiones (original y optimizado) para los meses de Abril y Mayo de 2006**

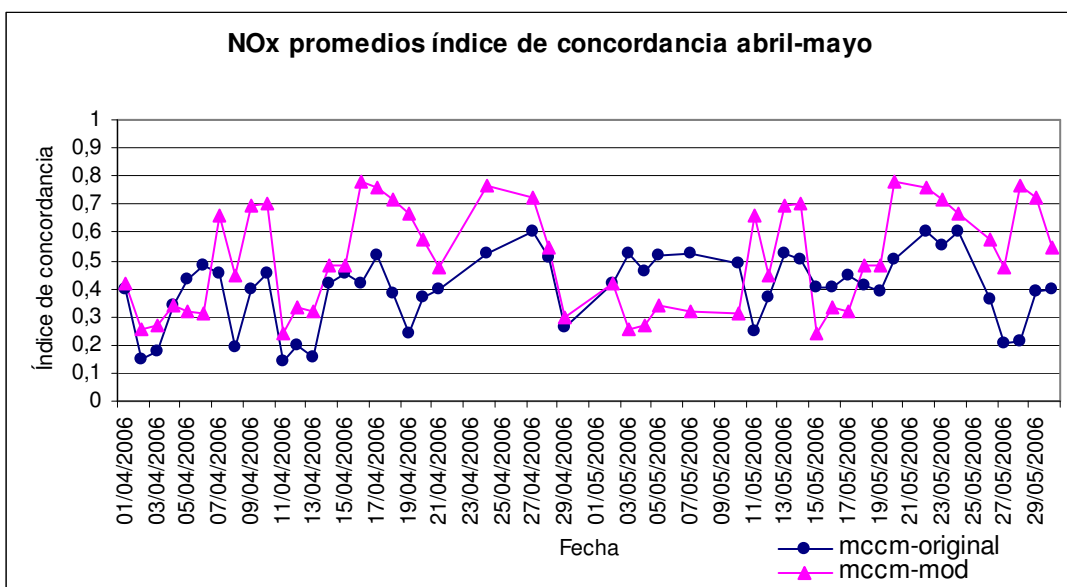
A continuación se muestran las gráficas comparativas del desempeño del modelo al utilizar ambos inventarios de emisiones (original y optimizado), para ello se muestran los promedios de los índices de concordancia.



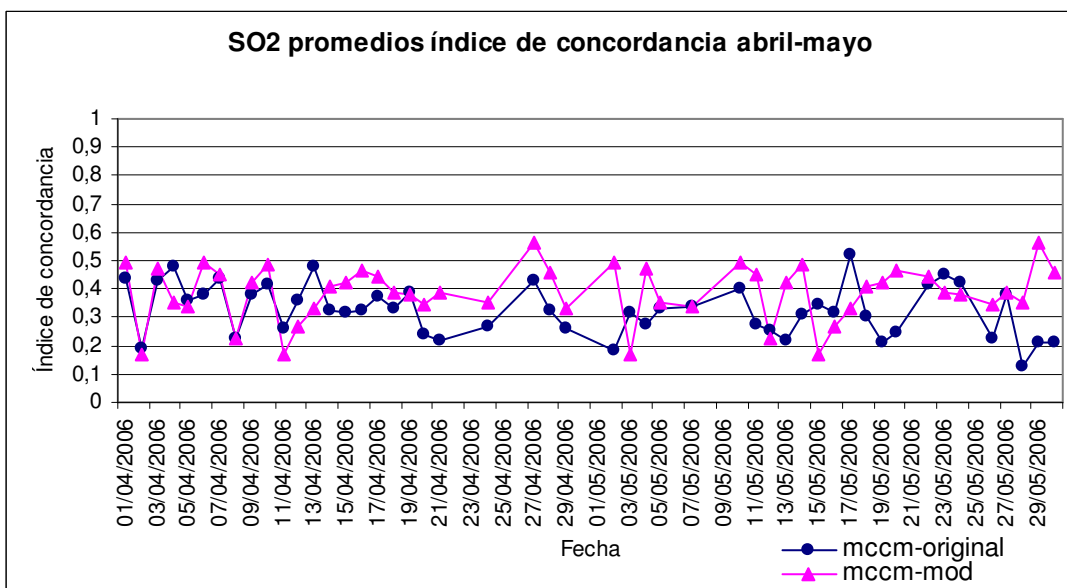
**Fig. 25** Promedios de los índices de concordancia para CO de los meses Abril y Mayo.



**Fig. 26** Promedios de los índices de concordancia para Ozono de los meses Abril y Mayo.



**Fig. 27** Promedios de los índices de concordancia de NO<sub>x</sub> de los meses Abril y Mayo.



**Fig. 28** Promedios de los índices de concordancia de SO<sub>2</sub> de los meses Abril y Mayo.

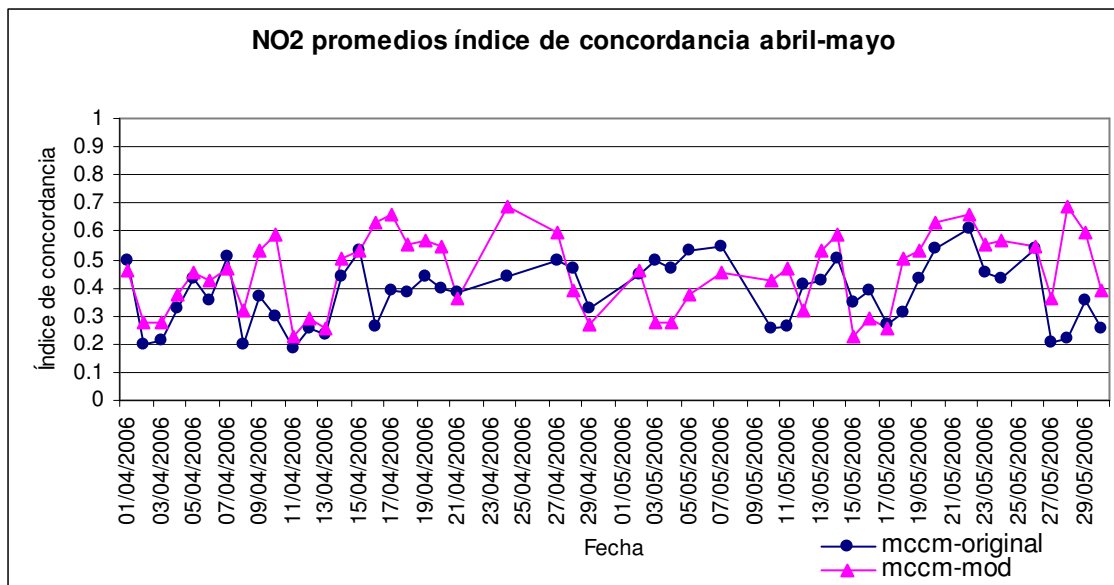


Fig. 29 Promedios de los índices de concordancia para NO<sub>2</sub> de los meses Abril y Mayo.

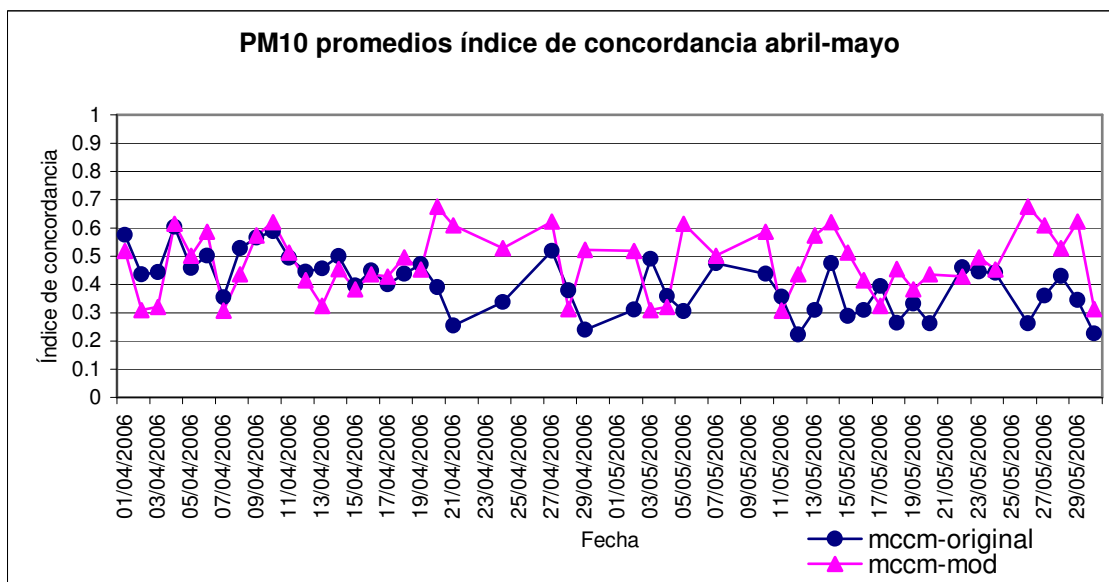


Fig. 30 Promedios de los índices de concordancia para PM<sub>10</sub> de los meses Abril y Mayo.

Cabe mencionar que el modelo de calidad del aire utilizó un inventario de emisiones con base al año 1998, el cual fue optimizado. A partir del día 19 de Abril de 2006 se comenzó a utilizar un inventario de emisiones con base al año 2000 para el pronóstico de la calidad del aire. Esto se puede apreciar ya que después de esta fecha el nivel de acierto del modelo aumentó. Aun así el modelo consiguió mejores resultados al utilizar el inventario de emisiones optimizado que tiene base 1998.



### **Análisis de resultados**

La modelación inversa que se presenta en este trabajo consistió en el ajuste de las emisiones a partir de las concentraciones ambientales medidas por la RAMA situadas al norte, al centro, al sur, al este y al oeste de la Zona Metropolitana del Valle de México. El análisis de transporte de contaminantes es una alternativa para una modelación inversa más detallada.

La predicción meteorológica juega un papel muy importante en la predicción de la calidad del aire, los datos meteorológicos obtenidos por el modelo permitieron la optimización del inventario de emisiones, demostrando así, que la parte con mayor incertidumbre dentro de la modelación de la calidad del aire recae en el inventario de emisiones.

Para realizar la evaluación del desempeño del modelo se compararon los datos de pronóstico con las mediciones realizadas en las estaciones, estos datos de las estaciones son valores puntuales y los valores de pronóstico son datos que representan el promedio de un volumen.

La capacidad de cómputo obliga a usar modelos no explícitos de química como RADM2 y RACM.

La metodología que se desarrollo en este trabajo se puede aplicar para optimizar el inventario de emisiones base 2000 en trabajos futuros.

## CAPÍTULO 5

### CONCLUSIONES

Mediante la optimización del inventario de emisiones se consiguió un pronóstico de ozono, óxidos de nitrógeno, bióxido de nitrógeno, monóxido de carbono, bióxido de azufre y PM<sub>10</sub> que reporta datos más cercanos a las mediciones, esto se aprecia en las Figuras 13,15, 17, 19, 21 y 23, en estas representaciones gráficas los resultados de las modelaciones (utilizando los inventarios de emisiones original y optimizado) fueron comparados con los resultados obtenidos por la RAMA, notándose que los resultados de las modelaciones fueron mejores cuando se utilizó el inventario de emisiones optimizado, además esta fiabilidad incrementada del pronóstico se observa de manera cuantitativa en las Tablas 20, 21, 22, 23, 24 y 25, exponiendo índices de concordancia más altos.

En esta investigación se generaron las herramientas necesarias para el manejo, evaluación y visualización de los datos. Destacando la aplicación de las métricas estadísticas que permiten realizar una evaluación objetiva de los datos, así como también las evaluaciones de los picos de concentraciones.

Con la aplicación del inventario de emisiones optimizado al modelo se alcanzó una mayor exactitud en la predicción de picos como se muestra en las Tablas 29 y 30, esto es muy importante porque la predicción de picos va ligada directamente del cumplimiento de las normas de calidad de aire. Estas mejoras de la predicción de picos se pueden observar al comparar las graficas de las Figuras 9 y 12

Para los meses Abril y Mayo de 2006 se lograron incrementar los índices de concordancia de las modelaciones de los diferentes contaminantes criterio, estas mejoras se pueden observar en las Figuras 25, 26, 27, 28, 29 y 30.

Cabe mencionar que durante el desarrollo de esta investigación se tuvo un interés especial en obtener un pronóstico fiable de ozono, ya que es uno de los contaminantes que frecuentemente rebasa la norma de la calidad del aire. Así los mejores resultados modelados al optimizar el inventario de emisiones fueron de ozono. Esto se puede apreciar en las diferencias notables de los análisis estadísticos de las Tablas 9 y 16.

Es importante que los resultados del modelo meteorológico sean representativos de la zona en estudio. Una mejor descripción al campo de vientos ayudó a inferir un inventario de emisiones más representativo de la zona.

El pronóstico emitido por este modelo se encuentra en fase experimental y de evaluación. Con la mejora al inventario de emisiones se logró que el pronóstico de la calidad del aire sea más fiable. En un futuro este pronóstico puede ser empleado para aplicar medidas de control y prevención anticipadamente a eventos extraordinarios de

contaminación atmosférica y principalmente para evitar la exposición a altos niveles de contaminación a la población en general.

Con las herramientas para el manejo, evaluación y representación de los datos que se desarrollaron en la presente investigación se podrán realizar mejoras al inventario de emisiones en futuros estudios.

## RECOMENDACIONES

El inventario de emisiones debe estar actualizado debido al gran dinamismo y crecimiento de la ciudad. Cabe mencionar que este inventario de emisiones debe ser continuamente evaluado.

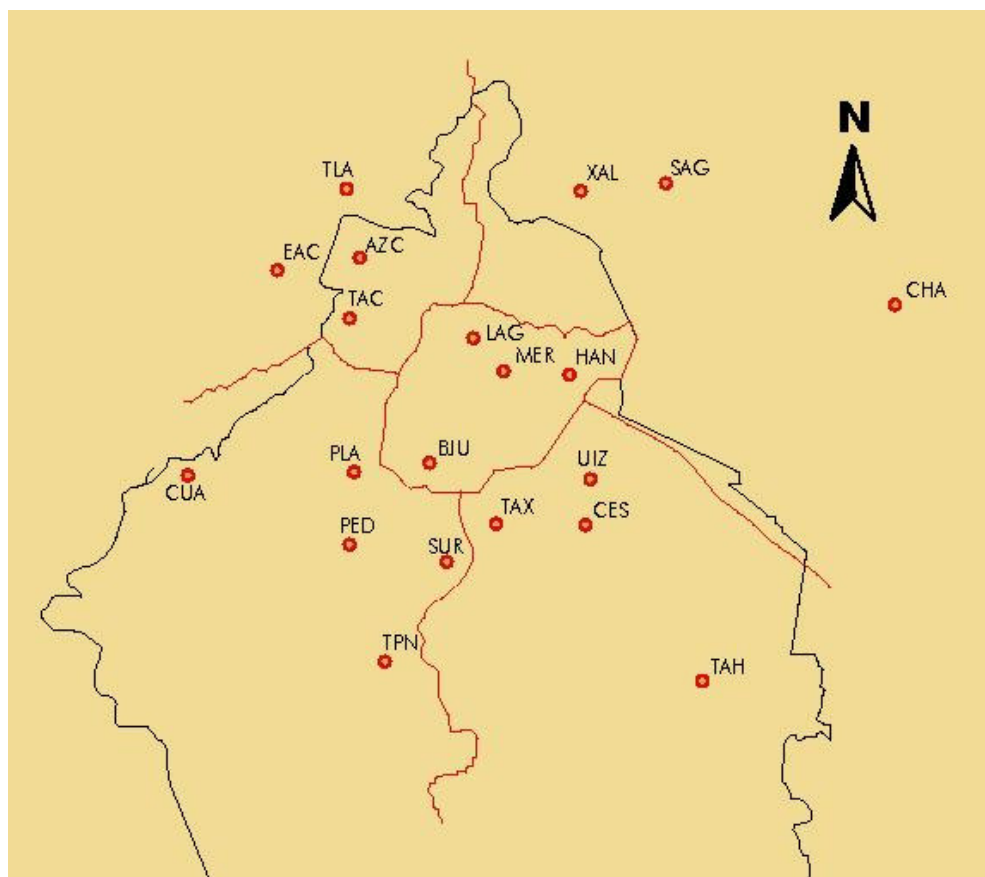
Es conveniente considerar la utilización de varios inventarios de emisiones para diferentes situaciones, esto debido a que durante el año se realizan actividades que pueden contribuir a variar las emisiones contaminantes, como por ejemplo: mayor producción en las industrias, mayor consumo de combustibles, etc. Además se deben considerar las variaciones de los flujos vehiculares que ocurren los sábados, domingos y días feriados.

Actualizar los factores de emisiones de fuentes biogénicas.

La meteorología juega un papel sumamente importante en la predicción de la calidad del aire, ya que la dispersión y las reacciones de contaminantes dependen de las condiciones atmosféricas, para los problemas de predicción meteorológica es importante la utilización de nuevas tecnologías de modelación a partir de parametrizaciones que describan adecuadamente los campos de viento sobre las zonas urbanas.

**Apéndice A**

**Estaciones de monitoreo de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico**



Acatlán	<b>EAC</b>	Pedregal	<b>PED</b>
Azcapotzalco	<b>AZC</b>	Plateros	<b>PLA</b>
Benito Juárez	<b>BIJU</b>	San Agustín	<b>SAG</b>
Cerro de la estrella	<b>CES</b>	Santa Ursula	<b>SUR</b>
Chapingo	<b>CHA</b>	Tacaba	<b>TAC</b>
Cuajimalpa	<b>CUA</b>	Taxqueña	<b>TAX</b>
Hangares	<b>HAN</b>	Tlahuac	<b>TAH</b>
Iztapalapa	<b>UIZ</b>	Tlalnepantla	<b>TLA</b>
Lagunilla	<b>LAG</b>	Tlalpan	<b>TPN</b>
Merced	<b>MER</b>	Xalostoc	<b>XAL</b>

**Apéndice B**

**Esquemas representativos del MCCM y del proceso de la modelación inversa**

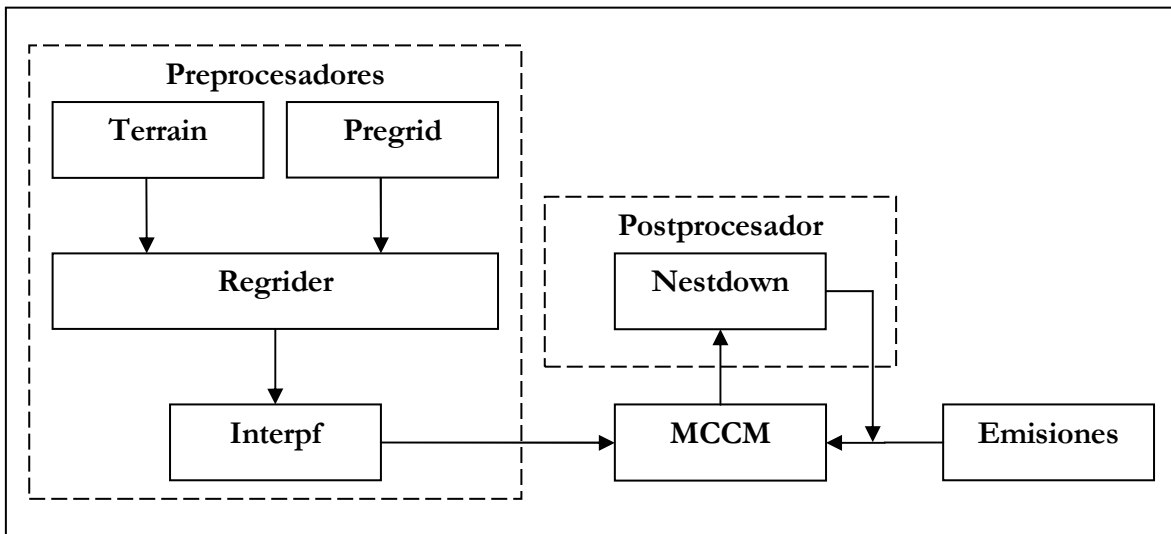


Diagrama de flujo de los procesadores necesarios para correr el MCCM.

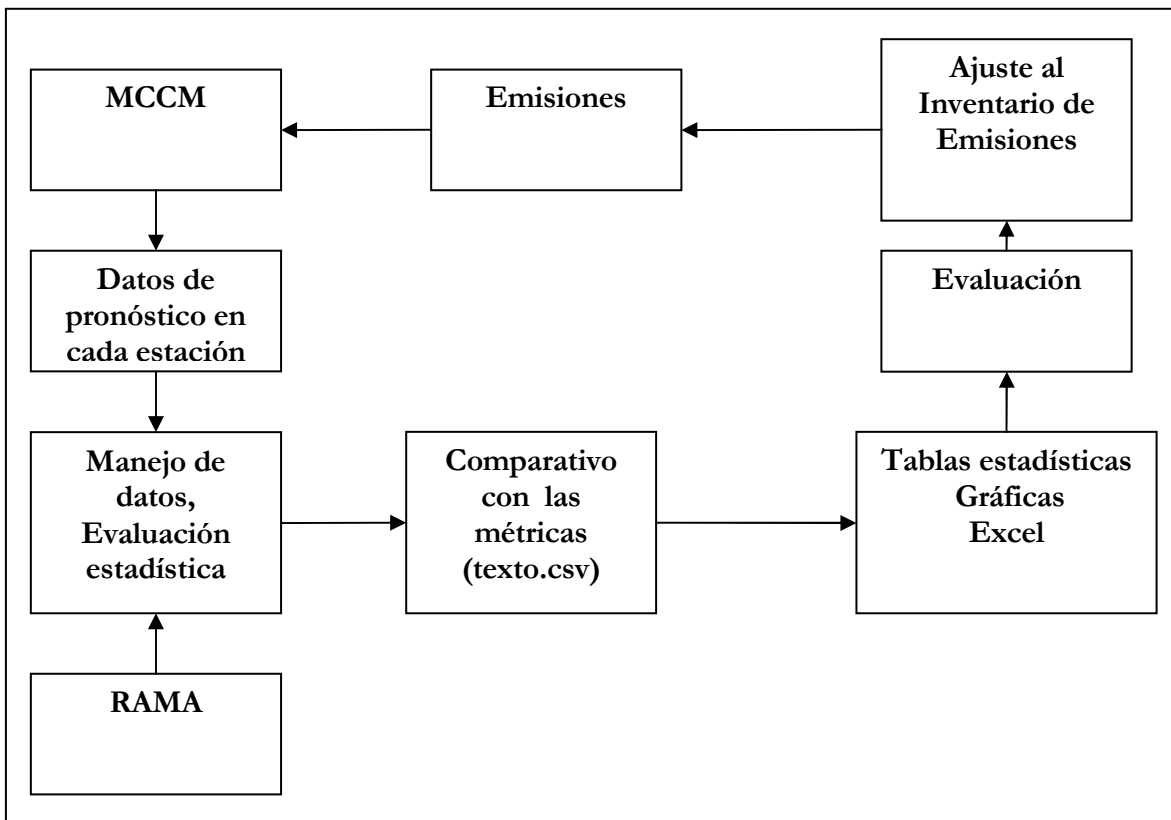


Diagrama de los pasos de la modelación inversa.

## Apéndice C

### Comisión Ambiental Metropolitana

La Comisión es un órgano de coordinación para la planeación de la política ambiental y la ejecución de acciones en la Zona Metropolitana del Valle de México

#### Sus objetivos de una manera general son:

- Coordinar y dar seguimiento en forma concurrente a los planes, políticas, programas, proyectos y acciones en materia de protección al ambiente, así como de preservación y restauración de equilibrio ecológico en el territorio de la Zona Metropolitana del Valle de México.
- Diseño de programas emergentes de atención a la problemática ambiental.
- Generación de estrategias específicas de sensibilización y concientización ciudadana.

#### Algunos proyectos realizados por la Comisión Ambiental Metropolitana

- Constitución del Fideicomiso Ambiental.
- Fortalecimiento de la Red Automática del Monitoreo Atmosférico.
- Programas para mejorar la calidad del aire en Valle de México (PICA y PROAIRE)
- Programas de contingencias ambientales,
- Verificación vehicular y programa “Hoy no circula”.
- Inventario de emisiones.
- Programa rector metropolitano integral de educación ambiental 2000 – 2002 (PREMIA).
- Programa integral para el manejo adecuado de los aceites lubricantes usados automotrices.
- Elaboración de manuales de minimización de residuos.
- Programa de Recuperación de Vapores de Gasolina en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México.
- Programa Metropolitano de Recursos Naturales

#### Sus principales funciones:

- Definir, coordinar y dar seguimiento de las políticas, programas, planes y proyectos ambientales.
- Proponer acciones tendentes a prevenir y controlar la contaminación ambiental y el equilibrio ecológico.
- Realizar acuerdos y convenios para la instrumentación de acciones y programas ambientales.

- Propiciar la participación ciudadana, académica e interinstitucional.
- Establecer mecanismos de coordinación de acciones entre diferentes órdenes de gobierno.
- Evaluar el cumplimiento de los diversos acuerdos y determinaciones de la Comisión



## Apéndice D

### Programa para mejorar la calidad del aire en la Zona Metropolitana del Valle de México (PROAIRE 2002-2010)

El PROAIRE 2002-2010 tiene el objetivo de proteger la salud humana de los efectos nocivos causados por la contaminación atmosférica en la Zona Metropolitana del Valle de México.

Las metas que se establecen en este programa representan las disminuciones que pueden alcanzarse con los compromisos logrados a la fecha por la Comisión Ambiental Metropolitana. No obstante, este programa es un instrumento dinámico cuyas metas se irán ajustando en la medida que se incorporen nuevas opciones de reducción de los contaminantes del aire, con base en su viabilidad técnica y económica, la disponibilidad de recursos para su financiamiento y el consenso social necesario para su instrumentación.

#### Objetivos y metas del programa en relación a los siguientes contaminantes

##### Ozono

La Norma Oficial Mexicana establece que las concentraciones de ozono no deben exceder 0.11 ppm (100 puntos IMECA), en períodos de una hora, una vez al año. Todos los trabajos de modelación realizados hasta la fecha indican que para que en el año 2010 se cumpla con dicho límite, se requeriría reducir en más de un 70% las emisiones de los precursores del ozono (los óxidos de nitrógeno y los hidrocarburos), lo cual representa una meta difícil de lograr en el corto plazo por los altos costos económicos y sociales involucrados. Por ello, en un escenario más realista, las metas del programa con respecto a este contaminante son las siguientes:

- Eliminar las concentraciones de ozono superiores a 200 IMECA.
- Reducir el número de días en que las concentraciones de ozono se encuentren en el intervalo de 101 a 200 IMECA.
- Aumentar el número de días con concentraciones de ozono dentro del límite establecido por la norma (100 puntos IMECA o menos).

##### Partículas Menores a 10 micrómetros

La Norma Oficial Mexicana, establece que las concentraciones de  $PM_{10}$  no deben exceder  $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$  en períodos de 24 horas (100 puntos IMECA). También establece que las concentraciones promedio anual no deben exceder  $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . No obstante, la Organización Mundial de la Salud ha señalado que no hay un límite seguro para evitar los efectos nocivos de las partículas, por lo cual recomienda disminuir sus concentraciones

tanto como sea posible. Las metas del programa con respecto a este contaminante son las siguientes:

- Aumentar el número de días en que las concentraciones diarias de  $PM_{10}$  se encuentran dentro del límite establecido por la norma.
- Reducir el promedio anual de las concentraciones de  $PM_{10}$

### **Monóxido de carbono**

La Norma Oficial Mexicana establece que las concentraciones de este contaminante no deben exceder más de 11 ppm en períodos de 8 horas. En la revisión de dicha norma se propondrá el nuevo límite, podrá reducirse a 9 ppm en períodos de 8 horas, en concordancia con los criterios internacionales. Las metas del programa con respecto a este contaminante son las siguientes:

- Eliminar las concentraciones de monóxido de carbono que excedan el límite de 9 ppm (promedio de 8 horas).
- Reducir las concentraciones actuales de monóxido de carbono.

### **Bióxido de azufre**

La Norma Oficial Mexicana establece que los niveles de bióxido de azufre en el aire no deben exceder una concentración de 0.13 ppm en períodos de 24 horas. También establece que el promedio anual no debe ser mayor a 0.03 ppm. Las metas del programa para el año 2010 con respecto a este contaminante son las siguientes:

- Reducir las concentraciones promedio diario de bióxido de azufre.
- Reducir la concentración promedio anual.
- Evitar la ocurrencia de picos extraordinarios asociados con el uso indebido de combustibles de alto contenido de azufre.

### **Bióxido de Nitrógeno**

La Norma Oficial Mexicana establece que los niveles en el aire no deben exceder una concentración de 0.21 ppm en períodos de 1 hora. Las metas del programa para el año 2010 con respecto a este contaminante son las siguientes:

- Aumentar el número de días con concentraciones de ozono dentro del límite establecido por la norma (100 puntos IMECA o menos).

**Reducción de emisiones necesaria para cumplir con las metas de calidad del aire**

La información científica disponible indica que la reducción del O<sub>3</sub>, PM<sub>10</sub> y PM<sub>2.5</sub> debe hacerse en forma integrada. Ello se debe a que ambos contaminantes se derivan en gran medida de las mismas emisiones primarias y a que los dos contaminantes se relacionan a través de los procesos fotoquímicos en la atmósfera que les dan origen.

Para alcanzar simultáneamente las metas del O<sub>3</sub>, PM<sub>10</sub> y PM<sub>2.5</sub>, se requiere la reducción de las emisiones de los contaminantes primarios que les dan origen. Así, el programa se enfoca a reducir las emisiones de los siguientes contaminantes primarios:

- Partículas provenientes de vehículos automotores a gasolina y diesel, polvo de calles y carreteras, industriales, procesos de combustión de comercios y servicios, incendios forestales, entre otros.
- Óxidos de nitrógeno generados principalmente en los procesos de combustión de la industria y los vehículos automotores.
- Compuestos orgánicos volátiles provenientes del uso de combustibles y productos orgánicos en los sectores del transporte, la industria, servicios y doméstico, y
- Bióxido de azufre generado por la combustión en vehículos e industria.

**GLOSARIO**

$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Microgramos por metro cúbico
<b>COV's</b>	Compuestos orgánicos volátiles
<b>DATGEN</b>	Base de datos de emisiones puntuales elaborada por el INE
<b>GDF</b>	Gobierno del Distrito Federal
<b>Ic</b>	Índice de concordancia
<b>IMP</b>	Instituto Mexicano del Petróleo
<b>INE</b>	Instituto Nacional de Ecología
<b>INEGI</b>	Instituto Nacional de Estadística Geografía e Informática.
<b>MCCM</b>	Mustiscale Climate Chemistry Model. Desarrollado por el instituto Fraunhofer, Alemania
<b>MM5</b>	Modelo Mesoescala de quinta generación desarrollado por Penn State y de la NCAR
<b>Nb</b>	Tendencia del error normalizado
<b>NCAR</b>	National Center for Atmospheric Research
<b>Nge</b>	Error craso normalizado
<b>OCOVb</b>	Otros compuestos orgánicos volátiles biogénicos
<b>OMS</b>	Organización Mundial de Salud
<b>PM<sub>10</sub></b>	Partículas menores a 10 micras
<b>PM<sub>2.5</sub></b>	Partículas menores a 2.5 micras
<b>PPA</b>	Exactitud de picos en el sitio
<b>ppm</b>	Partes por millón
<b>PROAIRE</b>	Programa para mejorar la calidad del aire en la Zona Metropolitana del Valle de México
<b>RACM</b>	Regional Atmospheric Chemistry Mechanism
<b>RADM2</b>	Rain Acid Deposition Model
<b>RAMA</b>	Red Automática de Monitoreo Atmosférico
<b>RMSD</b>	Raíz cuadrática de las diferencias medias entre los valores predichos y los observados
<b>RMSDs</b>	Raíz sistemática cuadrática media de la desviación, entre valores medidos y modelados.
<b>RMSDu</b>	Raíz no sistemática cuadrática media de la desviación, entre valores medidos y modelados.
<b>TPPA</b>	Exactitud temporal de pico

**BIBLIOGRAFÍA**

- Colin Baird: 2001, *Química ambiental*. Reverte. 88-103
- DDF, Dirección del Medio Ambiente: 1995, *Programa para mejorar la calidad del aire. DDF, DGPC, 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.
- de Foy, B. , Clappier, A., Molina, L. T. and Molina, M. J.: 2006, *Distinct wind convergence patterns in the Mexico City basin due to the interaction of the gap winds with the synoptic flow*. Atmos. Chem. Phys., 6, 1249-1265
- 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
- Figueruelo: 2001, *Química física del medio ambiente*. Reverte. 11-62
- García Reynoso, Agustín: 2002, *Evaluación de escenarios utilizando el modelo regional de calidad del aire Multiscale Climate Chemistry Model*. Tesis de Doctorado. Centro de Ciencias de la Atmósfera, UNAM. 111pp.
- GDF: 2004, *Inventario de Emisiones de la Zona Metropolitana del Valle de México*. Gobierno del Distrito Federal
- 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.
- Grell, G.A., Emeis, S., Stockwell, W.R., Schoenemeyer, T., Forkel, R., Michalakes, J., Knoche, R., Seild, W.: 2000, *Application of a multiscale, coupled MM5/Chemistry model to the complex terrain of the VOLTAP valley campaign*. Atmos. Environ. 34, 1435-1453
- Guenther, A. B., Zimmerman, P. R., Harley, P. C., Monson, R. K., y Fall, R.: 1993, *Isoprene and Monoterpene emission rate variability: Model evaluations and sensitivity analyses* J. Geophys. Res., 98D:12609–12617

- Guenther, A. P., P. R. Zimmerman, M. Wildermuth: 1994, *Natural volatile organic compound emission rate estimates for U.S. woodlands landscapes*. Atmos. Environ. 19, 1–8.
- Harrison, Roy H.: 1999, *El medio ambiente, Introducción a la química medioambiental y la contaminación*. Acriba. 9-33
- Jacobson, M. Z., Lu, R., Turco, R. P.: 1996, *Development and application of a new air pollution modeling system- Part I: Gas-phase simulations*. Atmos. Environ. 1939-1963
- Jazcilevich D. A., A. García, Caetano E.: 2005, *Meteorology and pollution modeling in the Valley of México*. Centro de Ciencias de la Atmósfera, UNAM
- Jiménez Cisneros, Blanca Elena: 2002, *La contaminación ambiental en México: causas, efectos y tecnología apropiada*. Limusa. 317-350
- Middleton, P., W. Stockwell, y W. P. L. Carter: 1990, *Aggregation and analysis of volatile organic compound emissions for regional modeling*. Atmos. Environ. 24A, 1107–1133.
- Middleton, P.: 1987, *Analysis of emissions database for regional models*. Atmos. Environ. 21, 1497–1509
- Schoenemeyer, T., K. Richter, 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, Garmish-Partenkirchen
- Simpson, D., A. Guenther, C. Hewitt, y R. Steinbrecher: 1995, *Biogenic Emissions in Europe. 1. Estimates and uncertainties*. J. Geophys. Res. 100D, 22875–22890.
- Stauffer, D. R. y N. L. Seaman: 1994, *Multiscale four-dimensional data assimilation*. J. Appl. Met. 33, 416–434.
- 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., Middleton, P., Chang, J. S., y Tang, X.: 1995, *The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling*, J. Geophys. Res., 95:16343–16367.
- Tesche, T.W.: 1988, *Accuracy of ozone air quality models*. J. Environ. Engng, 114, 739-752.
- Willmott, C. J.: 1981, *On the validation of models*. Phys. Geography 2, 184–194.