INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY CAMPUS MONTERREY DIVISION DE INGENIERIA PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA



SENSIBILIDAD DE LOS NIVELES DE OZONO A SUS
PRECURSORES EN EL AREA METROPOLITANA DE MONTERREY
Y EL NORESTE DE MEXICO

TESIS

PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA
OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS
ESPECIALIDAD EN SISTEMAS AMBIENTALES

POR: ALEJANDRO SIERRA CERDA

MONTERREY, N. L.

SEPTIEMBRE 2011

INSTITUTO TECNOLOGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY

CAMPUS MONTERREY

DIVISION DE INGENIERIA

PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA



SENSIBILIDAD DE LOS NIVELES DE OZONO A SUS
PRECURSORES EN EL AREA METROPOLITANA DE MONTERREY
Y EL NORESTE DE MEXICO

TFSIS

PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS ESPECIALIDAD EN SISTEMAS AMBIENTALES

POR:

ALEJANDRO SIERRA CERDA

MONTERREY, N. L.

SFPTIFMBRE 2011

INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY

CAMPUS MONTERREY DIVISIÓN DE INGENIERÍA PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERÍA



SENSIBILIDAD DE LOS NIVELES DE OZONO A SUS PRECURSORES EN EL ÁREA METROPOLITANA DE MONTERREY Y EL NORESTE DE MÉXICO

TESIS

PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS ESPECIALIDAD EN SISTEMAS AMBIENTALES

POR: ALEJANDRO SIERRA CERDA

MONTERREY, N. L.

SEPTIEMBRE 2011

DEDICATORIA

DEDICATORIA
A mis padres, Hermilo y Martha.
A mis hermanos Mónica, Mayela y Hermilo.
A mis sobrinos; Alicia y Carlos Daniel, que está en camino.
Por estar cuando más los necesito.

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Alberto Mendoza, por sus acertados consejos, paciencia y apoyo otorgado para el desarrollo de esta tesis.

Al Dr. Gerardo Mejía, que confió en la realización de este proyecto de principio a fin y proporcionó los medios necesarios para su éxito.

Al Dr. Sergio Gallegos, por el apoyo y confianza brindados a este proyecto así como por su participación como sinodal de esta investigación.

A mi compañera y amiga; Ana Vanoye, ya que sus consejos y ayuda fueron fundamentales a lo largo de estos 2 años de trabajo.

A Cátedra de Mecánica Computacional, por el apoyo económico y técnico recibido a lo largo de la maestría, sin el cual este trabajo no existiría.

A la Cátedra de Ingeniería de la Contaminación Atmosférica, que proporcionó las instalaciones y equipo idóneo para trabajar en este proyecto y facilitó los recursos económicos necesarios para la conclusión de ésta empresa.

Al ITESM y al CONACYT por la confianza y recursos puestos a disposición de este trabajo llevado a cabo durante la maestría.

A mi familia en Monterrey desde hace algunos años: Imelda, Imelda G., Rocío, Azul, Elías, Georgina, Robe, Montse, Stephany, Lili y Christian.

A mis amigos de Saltillo: Armando, Alma, Cesia, Dalia, Darío, Ricardo y Xóchitl, que son una razón más para regresar.

A mis amigos de la MSA: Abel, Alvaro, Citlali, Enrique, Esteban, Francisco, Gilberto, Cayetano, Jessica, Kérim, Luciano, Marisol, Nidia y mis compañeros con los que compartí este tiempo.

A mis compañeros de oficina que rápidamente se convirtieron en amigos, con los cuales pase momentos muy agradables: Ana, Eder, Hugo, Johana, Lizette, Mónica, Maritza y Yasmany.

RESUMEN

El Área Metropolitana de Monterrey (AMM) presenta problemas constantes de contaminación ambiental. Una de las principales preocupaciones son las altas concentraciones de ozono (O₃) troposférico que se presentan año con año. Las normas mexicanas de calidad ambiental que rigen el control de la concentración de ozono se violan constantemente en la región.

Se modeló un episodio de alta contaminación por O_3 , el cual comprendió el periodo del 22 al 27 de agosto del año 2005. Se utilizó el sistema MM5-SMOKE-CMAQ de la EPA, con el cual se obtuvieron resultados satisfactorios al evaluar estadísticamente el desempeño del modelo meteorológico y fotoquímico para reproducir el caso base. En este trabajo se presentan y discuten los resultados de 24 escenarios de control de emisiones de NOx y COV's, principales precursores de la formación de O_3 . La máxima reducción propuesta fue de 50% en la emisión tanto de NOx como de COV's. Esto permite considerar reducciones técnicamente factibles.

Los resultados mostraron que la reducción en la emisión de COV's tiene un impacto local. Por otro lado, la disminución en la emisión de NOx presentó un efecto regional más amplio, impactando en las concentraciones de O₃ viento abajo de las fuentes de emisión. Los resultados demuestran que al reducir la emisión de COV's se reduce la concentración máxima diaria de O₃ en el AMM. Para el caso de una reducción del 50% en las emisiones de COV's, se calcularon reducciones de 10 ppb de O₃, al pasar de 77 ppb a 67 ppb. Se observó también que el efecto de reducir la emisión de NOx en la región incrementó la concentración máxima diaria de O₃. Para una reducción del 50% en las emisiones de NOx, se calculó un incremento de hasta 18 ppb en el AMM al pasar de 77 ppb a 95 ppb.

Una de las principales aportaciones de este trabajo, fue el obtener una herramienta para la toma de decisiones en cuestión de control de la contaminación por altos niveles de O₃ en el AMM y el noreste de México. Los resultados presentados en este trabajo permiten concluir que las mejores estrategias de control son aquellas que reducen la emisión de COV's.

Resumen

CONTENIDO

1	INTE	ODUCCIÓN	1
	1.1	Antecedentes	1
	1.2	Contexto de la Investigación: Área Metropolitana de Monterrey (AMM)	2
	1.3	Objetivos	3
	1.3.	1 General	3
	1.3.	Objetivos Específicos	3
	1.4	Alcances del Estudio	4
	1.5	Justificación	4
	1.6	Distribución de la tesis	5
2	MAI	RCO TEÓRICO	7
	2.1	Principales contaminantes: fuentes y efectos	7
	2.1.	Regulación de contaminación atmosférica en México	7
	2.1.	2 Material particulado	11
	2.1.	3 Monóxido de carbono	12
	2.1.	4 Bióxido de Azufre (SO ₂)	13
	2.1.	5 Óxidos de Nitrógeno	14
	2.1.	6 Ozono	14
	2.2	Producción Fotoquímica del Ozono	15
	2.3	Modelos de Simulación Ambiental	16
	2.3.	1 Modelos de Calidad del Aire	16
	2.3.	2 Modelos Eulerianos	17
	2.3.	3 Modelo CMAQ	17
	2.4	Análisis de Sensibilidad	19
	2.5	Investigaciones Anteriores Sobre el Comportamiento de Contaminantes	19

	2.6	Inve	entarios de Emisiones	21
3	MET	rodc	DLOGÍA	23
	3.1	Sele	ección del Episodio de Modelación	24
	3.2	Met	teorología: el MM5	25
	3.2.	1	Descripción del Modelo	25
	3.2.	2	Aplicación del MM5 al episodio de modelación	28
	3.2.	3	Evaluación estadística del desempeño del modelo meteorológico	30
	3.3	Inve	entarios de Emisiones	32
	3.4	Мо	delación de la Calidad del Aire: el CMAQ	34
	3.4.	1	Evaluación estadística del desempeño del modelo fotoquímico	35
	3.5	Esce	enarios de Reducción	37
	3.6	Her	ramientas de análisis de resultados de los escenarios de reducción	38
	3.6.	1	Isopletas de Ozono	.38
	3.6.		Mapas comparativos de diferencia entre el caso base y los principales escenarios	
			n	
4	RES		ADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	
	4.1		ección del dominio de modelación	
	4.2	Sele	ección del Episodio de Modelación	. 43
	4.3	Eva	luación estadística para replicar el caso base	47
	4.3.	1	Evaluación estadística del desempeño del modelo Meteorológico	. 47
	4.3.		Evaluación estadística del desempeño del CMAQ	. 50
	4.3. 4.4	.2		
		2 Isop	Evaluación estadística del desempeño del CMAQ	. 59
	4.4	2 Isop Ma	Evaluación estadística del desempeño del CMAQ	. 59 . 65
5	4.4 4.5 4.6	2 Isop Ma Otr	Evaluación estadística del desempeño del CMAQ pletas de O ₃ para el AMM pas comparativos de diferencia entre el caso base y los escenarios de reducción	. 59 . 65 . 75

	5.2	Recomendaciones	79
6	REF	ERENCIAS	30
Α	PÉNDIC	E A: NOMENCLATURA	87
Α	PÉNDIC	E B: ESPECIACIÓN CB - V	89
٧	ITA		91

viii

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 Municipios del AMM 2
Figura 2.1 Ciclo del O₃ en presencia de HC (Seinfeld y Pandis, 2006)16
Figura 2.2 Módulos necesarios para ejecutar el CMAQ Models-3 (Byun y Shere, 2006) 18
Figura 3.1 Diagrama de la metodología para evaluar la sensibilidad de la concentración de O_3 a
cambios en la emisión de NOx y COV's23
Figura 3.2 Combinaciones de % de reducción de emisiones de NOx y COV´s (●) para los cuales fue
evaluada la concentración de O ₃ . La esquina superior derecha representa el caso base
Figura 4.1 Dominio de modelación DO1 y anidamiento de los dominios DO2 y DO341
Figura 4.2 Dominio de modelación DO2 y anidamiento del dominio DO341
Figura 4.3 Dominio de modelación DO3 y ubicación de las principales zonas urbanas dentro del
mismo
Figura 4.4 Árbol de regresión para O ₃ en Monterrey durante el año 2005. Error! Bookmark not
defined.
Figura 4.5 Concentraciones máximas diarias de O₃ durante el 2005 en la estación Santa Catarina.46
Figura 4.6 Concentraciones máximas diarias de ozono durante el 2005 en la estación Obispado 47
Figura 4.7 Estaciones de monitoreo ambiental ubicadas en el domino 3
Figura 4.8 Serie de tiempo de la concentración de O_3 simulada (azul x) vs observada (roja +) en la
estación Obispado
Figura 4.9 Serie de tiempo de la concentración de O_3 simulada (azul x) vs observada (roja +) en la
estación San Nicolás
Figura 4.10 Serie de tiempo de la concentración de O ₃ simulada (azul x) vs observada (roja +) en la
estación San Bernabé
Figura 4.11 Serie de tiempo de la concentración de O ₃ simulada (azul x) vs observada (roja +) en la
estación La Pastora
Figura 4.12 Serie de tiempo de la concentración de O_3 simulada (azul x) vs observada (roja +) en la
estación Santa Catarina57
Figura 4.13 Gráfica de dispersión de O3 simulado vs observado para estaciones CE, NE, NO y SE,
para los días 24 (a), 25 (b), 26 (c), y 27 (d) de agosto de 2005
Figura 4.14 Gráfica de dispersión de O3 simulado vs observado para estaciones CE, NE, NO y SE,
durante todo el episodio (corte de 40 ppb)59

Índice de Figuras ix

Figura 4.15 Isopletas de O_3 para estación Obispado 25 y 26 de agosto de 2005. Concentración de
O_3 en caso base 56 y 77 ppb para los dias 25 y 26 respectivamente
Figura 4.16 Isopletas de O₃ para estación San Nicolás 25 y 26 de agosto de 2005. Concentración de
O_3 en caso base 62 y 76 ppb para los dias 25 y 26 respectivamente
Figura 4.17 Isopletas de ${\sf O_3}$ para estación San Bernabé 25 y 26 de agosto de 2005 . Concentración
de O_3 en caso base 61 y 81 ppb para los dias 25 y 26 respectivamente62
Figura 4.18 Isopletas de O₃ para estación La Pastora 25 y 26 de agosto de 2005. Concentración de
O_3 en caso base 58 y 72 ppb para los dias 25 y 26 respectivamente
Figura 4.19 Concentración simulada de O_3 en la estación Centro del SIMA para el día 26 de agosto
de 200566
Figura 4.20 Mapa de la diferencia de concentración de ${\sf O}_3$: caso de reducción de 25% de COV´s 67
Figura 4´.21 Mapa de la diferencia de concentración de O_3 : caso de reducción de 25% de COV´s. y
25% de NOx
Figura 4.22 Mapa de la diferencia de concentración de O_3 : caso de reducción de 25% de $NOx.69$
Figura 4.23 Mapa de la diferencia de concentración de O₃: caso de reducción de 50% de COV´s 70
Figura 4.24 Mapa de la diferencia de concentración de O_3 : caso de reducción de 50% de COV 's y
25% NOx71
Figura 4.25 Mapa de la diferencia de concentración de O_3 : caso de reducción de 50% de COV 's y
50% NOx72
Figura 4.26 Mapa de la diferencia de concentración de O_3 : caso de reducción de 25% de COV´s y
50% NOx72
Figura 4.27 Mapa de la diferencia de concentración de O₃: caso de reducción de 50% de NOx 73
Figura 4.28 Serie de tiempo para la estación Obispado para escenarios más representativos 74
Figura 4.29 Serie de tiempo para la estación San Bernabé para escenarios más representativos 75

x Índice de Figuras

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2.1 Fuentes de contaminantes atmosféricos (Álvarez, 2002)
Tabla 2.2 Normas de calidad del aire para contaminantes atmosféricos en México9
Tabla 2.3 Días sobre la norma globales por contaminante en el AMM de 1993 a 2010 10
Tabla 2.2.4 Inventario de emisiones del AMM año base 2005
Tabla 2.5 Efectos del Bióxido de Azufre sobre la salud humana (Davidson et al., 1994)14
Tabla 2.6 Investigaciones anteriores sobre dispersión de contaminantes
Tabla 3.1 Esquemas de parametrización empleados en las aplicaciones del MM5 30
Tabla 3.2 Estadísticos utilizados para la evaluación del MM5 (Emery et al., 2001)31
Tabla 3.3 Criterios guía para la evaluación estadística del desempeño del modelo MM5 (Emery et
al., 2001)
Tabla 3.4 Criterios guía para la evaluación estadística del desempeño del modelo CMAQ. (EPA,
1991; USEPA, 2008)
Tabla 3.5 Guías para evaluar el desempeño de un modelo fotoquímico (EPA, 2001) 36
Tabla 3.6 Escenarios de reducción para los cuales se generaron mapas de diferencia39
Tabla 4.1 Configuración de los dominios de modelación
Tabla 4.2 Concentración de O3 y número de días de los nodos terminales45
Tabla 4.3 Parámetros estadísticos para el modelo meteorológico
Tabla 4.4 Resumen del desempeño estadístico para la predicción del O ₃ horario en la aplicación del
CMAQ 2002 (USEPA, 2008)
Tabla 4.5 Parámetros estadísticos del desempeño de CMAQ para O ₃
Tabla 4.6 Sensibilidad de la concentración de O ₃ , máximos incrementos y reducciones ante
escenarios propuestos
Tabla 4.7 Cambio en el nivel máximo de O_3 con uso de Gas Natural Vehicular (CMM,2009) 76
Tabla 4.8 Cambio en el nivel máximo de O3 (Reducción de 12.5% NOx y 37.5% COV's)76
Tabla 6.1 Nombres de las especies para el mecanismo CB05 (Yarwood <i>et al.</i> 2005)

Índice de Tablas x

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

La contaminación del aire se define como la presencia indeseable de material en éste, en cantidades tales que resulten nocivas para la salud. Ésta aseveración no se refiere únicamente a los contaminantes de origen antropogénico, pero regularmente se habla sólo de ellos ya que, aunque existen fuentes fuera del control humano, es en las zonas más densamente pobladas donde se presentan los mayores problemas de contaminación debido a la actividad humana (Nevers, 2000).

El deterioro en la calidad del aire es consecuencia del estilo de vida actual, la forma en que se construyen las ciudades, como se transforman las materias primas en productos y la manera como se obtiene la energía. La principal causa de la contaminación atmosférica es la combustión, esencial para el hombre, pero cuando se lleva a cabo de forma incorrecta tiene como efecto la producción de contaminantes, como hidrocarburos no quemados, Monóxido de Carbono (CO), Dióxido de Azufre (SO_2), Óxidos de Nitrógeno ($NO_x = NO + NO_2$), entre otros (Wark, 2007).

El Ozono (O₃) troposférico es principalmente generado por dos clases de precursores: los Compuestos Orgánicos Volátiles (COV's) y NO_X. El proceso de formación fotoquímica de O₃ comienza con la reacción del radical OH con moléculas orgánicas. Las reacciones siguientes son catalizadas por NO_X en una compleja red de reacciónes de radicales libres (Seinfield y Pandis, 2006).

La emisión de precursores de un contaminante secundario, como el O₃, puede afectar su concentración de forma no lineal. Esto dificulta de manera considerable saber los efectos que pudieran tener ciertas estrategias de control de las emisiones de los precursores en el contaminante secundario. Una forma de atacar el problema es emplear modelos de calidad del aire, los cuales han sido aplicados exitosamente no sólo para simular las concentraciones de contaminantes ambientales, sino también para conocer su sensibilidad a cambios en las emisiones contaminantes (Cohan *et al.*, 2005).

1.2 Contexto de la Investigación: Área Metropolitana de Monterrey (AMM)

El estado de Nuevo León se encuentra en la zona noreste del país, entre los 98°17′ y 101°07′ longitud oeste y los 23°06′ y 27°50′ latitud norte. La superficie total del estado es de casi 64,000 km².

En la zona central del estado de Nuevo León, se encuentra el AMM (Figura 1.1), la cual está integrada por los municipios conurbados de Apodaca, Cadereyta Jiménez, Ciénega de Flores, General Escobedo, García, Guadalupe, Juárez, Monterrey, Pesquería, Santiago, Santa Catarina, San Nicolás de los Garza, San Pedro Garza García y Salinas Victoria. En la superficie del AMM se concentra casi el 88% de la población del estado (SEMARNAT y Gobierno de Nuevo León, 2009).

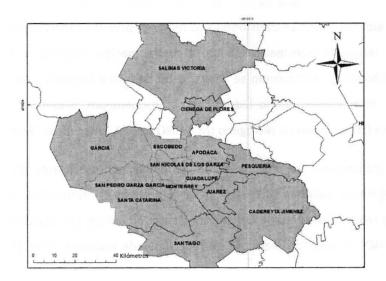


Figura 1.1 Municipios del AMM

El AMM cuenta con un Sistema Integral de Monitoreo Ambiental (SIMA), que es una red de estaciones de monitoreo atmosférico manejada por la Subsecretaría de Protección al Medio Ambiente y Recursos Naturales del gobierno del estado de Nuevo León. Desde su puesta en marcha, el SIMA ha monitoreado las concentraciones de los siguientes cinco contaminantes: O₃, SO₂, NOx, partículas con diámetro aerodinámico menor a 10 micras (PM₁₀) y CO. A partir de agosto del 2003 comenzó a monitorearse los niveles de partículas PM_{2.5}.

Las ubicaciones donde se encuentran las estaciones de monitoreo son (SIMA, 2011A):

- Estación sureste: Parque "La Pastora", en el municipio de Guadalupe, lejos de la influencia de fuentes industriales.
- Estación noreste: En la colonia Unidad Laboral, en el municipio de San Nicolás de los Garza, se encuentra en un corredor industrial, en una zona densamente poblada, con esta estación se miden los impactos de la industria de la zona.
- Estación centro: Dentro de las instalaciones de Agua y Drenaje de Monterrey en el Obispado; en esta estación es posible medir el impacto vehicular.
- Estación noroeste: Ubicada en los talleres de Metrorrey en la colonia San Bernabé en el municipio de Monterrey.
- Estación suroeste: En el centro del municipio de Santa Catarina, viento abajo de la mayoría de las fuentes industriales de Monterrey, San Pedro Garza García y Santa Catarina.
- Estación norte: Se encuentra en el municipio de General Escobedo, localizada dentro de un área de concentración poblacional, monitorea la contaminación generada por fuentes fijas y móviles del norte del AMM.
- Estación noroeste 2: Ubicada en el municipio de García, ésta estación está ubicada viento debajo de la mayoría de las fuentes industriales de García, en un área de alta concentración de población.
- Estación Noreste 2: En el municipio de Apodaca. Estación instalada el día 6 de junio de
 2011. Colocada viento abajo de una zona industrial, dentro de una zona comercial.

1.3 Objetivos

1.3.1 General

El objetivo general de este trabajo consiste en evaluar la sensibilidad en la concentración de O_3 en el Área Metropolitana de Monterrey (AMM) y el noreste de México debida a una reducción en la emisión regional de NO_x y COV's.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Modelar un episodio de alta contaminación por O₃ en el AMM utilizando el sistema de calidad del aire Community Multiscale Air Quality versión 4.7.1 (CMAQ 4.7.1) (Byun y Schere, 2006).
- Evaluar el desempeño alcanzado por el modelo CMAQ para predecir las concentraciones de O₃ en el episodio seleccionado.

 Simular las concentraciones de O₃ en el AMM bajo diferentes niveles de reducción de emisiones de NO_x y COV's, y generar superficies de respuesta para esta zona.

1.4 Alcances del Estudio

Se evaluó un episodio con altos niveles de contaminación por O₃ en el AMM, del 22 al 27 de agosto de 2005, utilizando el modelo CMAQ v4.7.1 para la simulación de la química ambiental y transporte de contaminantes. Los campos meteorológicos e inventarios de emisiones requeridos en la aplicación de CMAQ fueron construidos empleando los modelos MM5 (Grell *et al.*, 1994) y SMOKE (Lin *et al.*, 2005), respectivamente. El dominio de modelación incorpora una amplia región del noreste mexicano y el sur de Texas, con la finalidad de introducir los posibles efectos de transporte regional de contaminantes. Para el caso de los escenarios de reducción de emisiones de NO_X y COV's se plantean controles sobre toda el área de modelación en México, es decir, se considera que todas las fuentes bajo control reducen sus emisiones en la misma proporción.

Los resultados obtenidos son valiosos al permitir saber cuáles estrategias de control de emisiones pueden ser implementadas para mejorar la calidad del aire en el AMM y el noreste de México, conociendo su efecto anticipadamente.

1.5 Justificación

El problema de contaminación ambiental está presente en el AMM, lo cual tiene consecuencias en la salud de los habitantes de la zona, consecuencias que más adelante se abordaran de forma detallada. Por lo tanto, es importante evaluar distintas estrategias para el control de emisiones contaminantes a la atmósfera.

Los problemas de calidad del aire se relacionan directamente, pero no necesariamente proporcionalmente, con las emisiones de contaminantes a la atmósfera. El comportamiento de los contaminantes en la atmósfera puede ser evaluado utilizando modelos de calidad del aire, los cuales son una herramienta indispensable para la creación de políticas y procesos de control de emisiones (Hakami *et al.*, 2006).

Las emisiones que provienen de las distintas fuentes con las que cuenta el AMM, como lo son los vehículos automotores, la industria manufacturera, el sector servicios, las plantas de generación de energía eléctrica, las fuentes naturales, etc., contribuyen de forma importante en los contaminantes presentes en la región del AMM. Es por esto que evaluar una reducción en la masa

emitida por estas fuentes es necesario para conocer las ventajas de aplicar estrategias de control en esta región.

Los resultados que pueden ser obtenidos de un modelo fotoquímico, como el CMAQ, son de interés tanto para fines regulatorios como de investigación científica. Es de utilidad no sólo conocer el estado del aire ambiente a ciertas condiciones sino también su respuesta a perturbaciones en varios parámetros que la definen (Napolenok *et al.*, 2008), siendo las respuestas y sus tendencias futuras una de las principales razones para utilizar modelos de simulación de química y transporte de contaminantes (Brasseur y Madronich, 1992).

1.6 Distribución de la tesis

En el capítulo 1 se presentan los antecedentes generales de la contaminación ambiental, los objetivos a ser alcanzados, la justificación de este trabajo y una descripción de la región de estudio.

El capítulo 2 muestra los fundamentos teóricos que sustentan esta tesis, una descripción de los modelos de calidad del aire más utilizados, así como resultados de estudios anteriores enfocados en la sensibilidad del O₃ a la emisión de sus precursores.

En el capítulo 3 se describe la metodología utilizada para la realización de este proyecto. Se comienza con la selección del episodio a modelar, pasando por la descripción del modelo foroquímico utilizado y las herramientas de evaluación y análisis de resultados.

En el capítulo 4 se presentan y discuten los resultados obtenidos en este trabajo. El orden que se siguió fue el siguiente:

- Selección del dominio de modelación.
- Selección del episodio.
- Evaluación estadística del modelo meteorológico y del modelo fotoquímico.
- Isopletas de O₃ para el AMM.
- Mapas comparativos de diferencia entre el caso base y escenarios de reducción de emisiones.
- Series de tiempo para los escenarios mas representativos.
- Comparación de resultados contra otros estudios.

En el capítulo 5 se presentan las conclusiones de este proyecto. También se expresan las recomendaciones del autor para trabajos posteriores que sigan la misma línea de investigación.

2 MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presentan los fundamentos teóricos que respaldan este trabajo de tesis. El contenido de esta sección es el siguiente:

- Principales contaminantes: fuentes y efectos.
- Producción fotoquímica del O₃.
- Modelos de simulación ambiental.
- Investigaciones anteriores sobre el comportamiento de contaminantes.
- Inventarios de emisiones.

2.1 Principales contaminantes: fuentes y efectos

2.1.1 Regulación de contaminación atmosférica en México

Es necesario conocer cuales son los principales contaminantes que están presentes en zonas altamente pobladas, como lo es el AMM, por lo cual se describirán a continuación.

Stoker (1981) menciona cómo los cinco contaminantes principales los siguientes: monóxido de carbono (CO), NOx, hidrocarburos (HC), óxidos de azufre (SOx) y partículas suspendidas. Estos contaminantes son conocidos como contaminantes primarios, es decir son emitidos directamente por fuentes antropogénicas. Sin embargo, estos compuestos no permanecen como tal en la atmósfera, sino que reaccionan produciendo contaminantes secundarios, entre los que destacan: ácido sulfúrico, O₃, hidrocarburos oxigenados, material particulado, entre otros (Boubel *et al.*, 1994). En la Tabla 2.1 se muestran algunos de los principales contaminantes, así como los criterios para considerar un aire ambiente limpio y uno contaminado. También se muestran las principales fuentes a las que se atribuyen dichos contaminantes (Álvarez, 2002):

Tabla 2.1 Fuentes de contaminantes atmosféricos (Álvarez, 2002)

Sustancia	Limpio (ppm)	Contaminado (ppm)	Fuente	
SO ₂	0.0002	0.2	Combustibles fósiles: calderas, automóviles industria del azufre.	
CO ₂	320	400	Combustión, respiración.	
со	0.1	40-70	Combustión incompleta.	
CH₄	1.5	2.5	Descomposición orgánica.	
N ₂ O	0.25		Combustión, abonos, ciclo del nitrógeno, volcanes.	
NO _x	0.001	0.2	Combustión, abonos, ciclo del nitrógeno, volcanes.	
NH ₃	0.01	0.02	Descomposición de excrementos, industria.	
O ₃	0.01	0.02	Reacciones fotoquímicas, descargas eléctricas.	

Así mismo, existen normas en México que rigen las concentraciones máximas permisibles de ciertos contaminantes (DOF, 1994; DOF, 2002; DOF, 2005). Los valores criterio de calidad del aire establecen los límites sobre concentraciones de diversos contaminantes, con base en la protección de la población, dando prioridad a la mas suceptible, y son parámetros de vigilancia de la calidad del aire ambiente. En la Tabla 2.2 se muestran las normas de calidad del aire vigentes en México.

Tabla 2.2 Normas de calidad del aire para contaminantes atmosféricos en México

Contaminante	Norma Oficial	Niveles Máx	e Exposición	
	Mexicana Aguda		da	Crónica
		Concentración (Tiempo Promedio)	Frecuencia Máxima Aceptable	Concentracion (Tiempo Promedio)
Ozono (O ₃) ⁽²⁾	NOM-020-SSA1-1993	0.110 ppm (1 hora) 0.080 ppm (8 horas)	Una vez por año, en un periodo de tres años	NA
CO ⁽¹⁾	NOM-021-SSA1-1993	11 ppm (8 horas promedio renovable)	Una vez al año	NA
SO ₂ ⁽¹⁾	NOM-022-SSA1-1993	0.13 ppm (24 horas)	Una vez al año	0.03 ppm (PAA)
Dióxido de Nitrogeno (NO ₂) ⁽¹⁾	NOM-023-SSA1-1993	0.21 ppm (1 hora)	Una vez al año	NA
Partículas Suspendidas Totales (PST) ⁽³⁾	NOM-025-SSA1-1993	210 μg/m³ (24 horas)	24 horas	NA
Patículas PM ₁₀ ⁽³⁾	NOM-025-SSA1-1993	120 μg/m³ (24 horas)	24 horas	50 μg/m³ (PAA)
Patículas PM _{2.5} ⁽³⁾	NOM-025-SSA1-1993	65 μg/m³ (24 horas)	24 horas	15 μg/m³ (PAA)
Plomo ⁽¹⁾	NOM-026-SSA1-1993	NA	NA	1.5 μg/m ³ (PA de 3 meses)
Nota:	m³ = metros cúbicos NA = No Aplica μg = micro gramos		ppm = partes por m PAA = Promedio Ari Fuente: Diario Federación, 1994 ⁽¹⁾	nillón itmético Anual Oficial de l

El SIMA muestrea la mayoría de los contaminantes mostrados en la Tabla 2.2. Estos son: CO, SO₂, O₃, NO₂, PM₁₀ y PM_{2.5}. El fin de estas mediciones es tener un mayor conocimiento acerca del comportamiento de los contaminantes en el AMM e identificar posibles violaciones a las normas de calidad del aire. Como se puede observar en la

Tabla 2.3, la situación en el AMM es de constante incumplimiento de las normas oficiales de calidad del aire (SIMA, 2011B).

Se puede observar en la

Tabla 2.3 que los principales problemas en el AMM en cuestión de contaminación ambiental se presentan para las partículas PM₁₀ y para el O₃. Para estos contaminantes se viola la norma oficial

vigente en cada uno de los años reportados, lo cual genera un interés relevente en el estudio del comportamiento de O_3 en la región.

Tabla 2.3 Días sobre la norma globales por contaminante en el AMM de 1993 a 2010

AÑO	СО	SO ₂	O ₃	NO ₂	PM ₁₀
1993	0	0	37	1	44
1994	0	0	21	0	85
1995	1	0	5	0	27
1996	1	0	25	0	40
1997	1	0	31	0	9
1998	0	0	14	0	21
1999	3	0	9	0	85
2000	0	0	12	0	26
2001	0	0	13	0	90
2002	2	0	8	0	96
2003	0	0	14	0	130
2004	0	0	36	0	100
2005	0	0	34	0	121
2006	1	0	24	0	193
2007	0	0	17	0	147
2008	0	0	27	0	171
2009	0	0	12	0	79
2010	0	0	32	0	122

Como se ha mencionado anteriormente, es conveniente conocer las fuentes principales de contaminantes de origen antropogénico, ya que éstas se encuentran, por lo regular, en zonas urbanas donde las concentraciones humanas son mayores y por tanto las consecuencias en cuestión de impacto son mayores también.

Así mismo, conocer los principales actores en la producción de contaminantes es importante, ya que de ésta forma se puede tener un mejor control de la calidad del aire regional por medio de políticas que regulen la emisión de esos actores. Ese análisis fue realizado en México, utilizando el Inventario Nacional de Emisiones de México (INEM), arrojando los siguientes resultados para fuentes antropogénicas (SEMARNAT, 2006):

 Los vehículos automotores son los principales emisores de NOx y CO al contribuir en mas del 60% del total emitido. Así mísmo, son el segundo emisor más importante de COV´s.

- Las plantas de generación eléctrica producen la mayoría de las emisiones de SOx y se ubican en segundo lugar de NOx.
- Las emisiones de SOx, ademas de las plantas de generación eléctrica, tienen como fuente procesos de manufactura, refinerias de petróleo y otros combustibles fósiles, así como por consumo industrial de combustibles.
- En lo referente a los COV's, se tienen como fuentes principales el uso de solventes, circulación de vehículos automotores, distribución de combustibles y el consumo doméstico de combustibles vegetales.

La Tabla 2.2.4 presenta, a manera de ejemplo, el inventario de emisiones original para el AMM para el año base 2005.

Fuentes Emisiones (Toneladas/año) COV's PM₁₀ NOx CO PM_{2.5} SO₂ 59,093.5 **Fijas** 8,547.2 5,140.6 21,959.3 9,851.0 8,977.9 Móviles no 1,272.2 1,233.5 144.6 10,830.8 5,581.8 1,234.3 carreteras 31,762.0 51,867.8 Móviles 818.0 568.0 878.9 491,863.0 Área 42,790.0 9,414.2 23.2 2,363.7 2,498.5 47,751.7 **Naturales**^a 10,195.0 2,161.5 N/A 8.0 N/A 44.0 Total 63,622 18,518 60,140 66,924 509,794 109,876

Tabla 2.2.4 Inventario de emisiones del AMM año base 2005.

De la Tabla 2.2.4 se puede obtener un estimado de la relación molar entre las emisiones totales de COV's y NOx. Suponiendo un peso molecular promedio de los COV's de 92 g/gmol y un número promedio de 6 carbonos por molécula de COV, se obtiene una proporción COV's a NOx de 5.9, el cual es un indicador preliminar de que se trata de una zona inhibida por NOx (Seinfeld y Pandis, 2006).

2.1.2 Material particulado

El material particulado que se encuentra disperso en la atmósfera engloba al polvo, tierra, arena, ceniza, hollín, partículas de metales, cemento, diversos tipos de polen, material secundario, entre otros. Las PM₁₀, comprenden la fracción respirable, y debido a su tamaño, éstas pueden llegar

 ^a Emisiones por fuentes biogénicas documentadas en la base de datos original. Las emisiones alimentadas al modelo son diferentes ya que se procesaron explícitamente con el BEIS3. ^b N/A: No aplica.

hasta los alveolos pulmonares. Las PM₁₀ pueden interaccionar con NOx o SOx, y al combinarse con agua forman la lluvia ácida (Strauss y Mainwaring, 1990).

El material particualdo que entra en los pulmones puede ejercer un efecto tóxico de dos maneras distintas (Alvarez, 2002):

- 1. Partículas inertes por sí mismas, pueden interferir en los mecanismos de limpieza del tracto respiratorio, retrasando la eliminación de sustancias más nocivas.
- 2. Las partículas pueden transportar moléculas irritantes de gas (adsorbidas o absorbidas), lo que capacita a dichas moléculas para alcanzar y permanecer en las aéreas sensibles de los pulmones.

Una de las consecuencias debidas a las partículas son incrementos en la mortalidad. La mayor parte de éstas muertes se deben a problemas cardiovasculares y generalmente, ocurren en poblaciones vulnerables (niños y ancianos) (Arribas *et al.*, 2001). Del mismo modo, causan incrementos en los casos de bronquitis crónica, admisiones hospitalarias por causas respiratorias o cardiovasculares, ataques de asma, entre otros problemas (Hernández *et al.*, 2000).

Una exposición a largo plazo de material particulado contribuye a enfermedades crónicas, a incidencias de cáncer y a muertes prematuras. La EPA (Agencia de Proteccion Ambiental de los Estados Unidos, por sus siglas en inglés) estima que el 8% del cáncer de pulmón de no fumadores se debe a las PM₁₀ emitidas por los vehículos que funcionan con diesel.

2.1.3 Monóxido de carbono

El monóxido de carbono es un gas incoloro e inodoro que puede combinarse con la hemoglobina de la sangre, produciendo Carboxihemoglobina, que interviene con el intercambio de Oxígeno y en altas concentraciones, puede causar la muerte (Gutierrez, 2003).

Las fuentes de CO se pueden dividir en antropogénicas y naturales:

- Las fuentes antropogénicas se deben principalmente a la combustión incompleta de compuesto de carbono, como: gasolinas, diesel, combustóleo, carbón, coque de petróleo, gas natural, entre otros.
- Se debe poner especial atención a la acumulación intramuros por procesos domésticos como preparacion de alimentos, calefacción y el hábito de fumar (Alvarez, 2002; Gutierrez, 2003).

 El inventario de emisiones de la frontera norte de México estima que en el año de 1999 se emitieron a la atmósfera 1.264 millones de toneladas de CO en los estados de dicha frontera (Baja California, Coahuila, Chihuahua, Nuevo León, Sonora y Tamaulipas), siendo los vehículos automotores, la principal fuente de contribución, aportando mas del 70% de este contaminante (SEMARNAT, 2005).

2.1.4 Bióxido de Azufre (SO₂)

El SO_2 es uno de los óxidos dominantes del azufre presente en la atmósfera. A concentraciones mayores a 3 ppm, el gas tiene un olor a acre e irritable (Alvarez, 2002).

Cuando se oxida y se combina con agua produce Ácido Sulfúrico, uno de los principales componentes de la lluvia ácida. Es un contaminante que proviene de la combustión de carbón, diesel, combustóleo y gasolina que contenga Azufre. También se produce en las fundidoras de metales ricos en Azufre, en procesos industriales y por erupciones volcánicas (Strauss y Mainwaring, 1990).

Al analizar las fuentes en las cuales se producen las emisiones de SOx, es conveniente revisar el inventario realizado para los estados de la frontera norte de México, donde se observa que en esos estados la emisión total anual de este tipo de contaminantes fue de 687 mil toneladas, de las cuales el 42% es proveniente de fuentes naturales, y del total de emisiones antropogénicas, 36% se atribuyen a plantas de generación eléctrica y 24% a vehículos automotores que circulan por carreteras (SEMARNAT, 2005).

Se menciona en la literatura que los óxidos de Azufre, en presencia de partículas suspendidas, producen efectos más perjudiciales. Por ejemplo, Alvarez (2002) menciona:

- Formación de aerosoles, originando neblina al reaccionar fotoquímicamente con las partículas supendidas, NOx e hidrocarburos presentes en la atmósfera.
- Forman gotas de Ácido Sulfúrico que dispersan la luz.
- Aceleran la corrosión de metales.
- Alteran el tiempo de secado y la calidad final de las capas de pintura.
- Los sulfatos que tienen tamaños de 0.2 a 0.9 micras, influyen en la visibilidad y se depositan en la región pulmonar.

Por otro lado, es también de interés conocer las consecuencias que los Óxidos de Azufre tienen en la salud humana. Destaca el evento ocurrido en Londres en 1952, en el cual, a causa de un aumento en la concentración de partículas a 4000 μ g/m³ y de SO_2 a 0.95 ppm, hubo un incremento de muertes en el área (Davidson *et al.*, 1994).

En la Tabla 2.5 se presentan los efectos en humanos a distintas concentraciones y tiempos de exposición a SOx. Cabe mencionar que los efectos citados son, generalmente, aplicables a adultos sanos bajo condiciones experimentales.

Tabla 2.5 Efectos del Bióxido de Azufre sobre la salud humana (Davidson et al., 1994)

Concentración (ppm)	Tiempo de exposición	n Efectos		
0.15 - 0.25	1 – 4 días	Respuestas cardiorespiratorias.		
1.0 – 2.0	3 – 10 minutos	Respuestas cardiorespiratorias en individuos sanos.		
5.0	1 hora	Sofocamiento e incremento de resistencia en los pulmones.		
10.0	1 hora	Peligro severo, algunas emorragias nasales		

2.1.5 Óxidos de Nitrógeno

De los diferentes Óxidos de Nitrógeno que existen, los NOx, son importantes contaminantes del aire y precursores de la formación de O₃. Ni el NO ni el NO₂ causan daños directos a los materiales, sin embargo, el NO₂, puede reaccionar con la humedad presente en la atmósfera para formar Ácido Nítrico, que puede ser causa de corrosión en las superficies metálicas (Nevers, 2000).

Sobre los efectos a la salud humana, a concentraciones de 0.5 ppm ocasiona reacciones irritables funcionales y produce ciertos cambios morfológicos del árbol respiratorio, con contricción bronquial y disminución de la capacidad de ventilación respiratoria (Gutierrez, 1997).

2.1.6 <u>Ozono</u>

El O_3 es un gas incoloro e inestable, que se forma al reaccionar Óxidos de Nitrógeno y COV's en contacto con la luz solar (Strauss y Mainwaring, 1990). No hay emisiones antropogénicas importantes de O_3 a la atmósfera, ya que este es fundamentalmente un contaminate secundario (Alvarez, 2002).

A temprana hora del día en las zonas urbanas, las concentraciones de NOx permanecen relativamente bajas. Conforme aumenta la actividad humana, la concentración de los NOx

aumenta rápidamente. Con la influencia de la luz solar, se registra un aumento en la concentración de O₃, a la vez que la de su precusor, NO, disminuye (Seinfield y Pandis, 2006).

2.2 Producción Fotoquímica del Ozono

Con el fin de entender el porqué de las altas concetraciones de O_3 , se describe en esta sección su producción fotoquímica en la tropósfera.

Los precursores más importantes para la producción de O_3 son: CO, NO_X y COV's (Finlayson-Pitts, 2000). La química del O_3 puede ser representada de manera general por las siguientes reacciones (R1-R8).

R1
$$\cdot$$
 OH + CO + O₂ \rightarrow HO₂ + CO₂

R2 \cdot OH + HC + O₂ \rightarrow RO₂ + H₂O

R3 \cdot RO₂ + NO \rightarrow NO₂ + RO \cdot

R4 \cdot HO₂ + NO \rightarrow OH \cdot + NO₂

R5 \cdot NO₂ + hv + O₂ \rightarrow NO + O₃

R6 \cdot NO₂ + OH \cdot \rightarrow HNO₃

R7 \cdot HO₂ + HO₂ \rightarrow H₂O₂ + O₂

R8 \cdot NO + O₃ \rightarrow NO₂ + O₂

El ciclo de producción fotocatalítico de O_3 tiene dos rutas de formación determinante: la reacciones R1 y R2, que producen HO_2 y RO_2 en presencia de ${}^{\circ}OH$, CO y COV's; y las reacciones R3 y R4, las cuales forman NO_2 a partir de NO, HO_2 y RO_2 . La reacción global R2 condensa en un solo paso la formación intermedia de radicales RO, que eventualmente pasan a radicales RO_2 . La fotólisis de NO_2 conduce a la producción de O_3 por medio de R5, cuando la oxidación de NO_2 (R6), y la auto-oxidación de HO_2 a traves de R7 termina el ciclo.

En la reacción R3 se produce NO_2 a partir de NO si consumir O_3 , como sería el caso de la reacción R8 (parte del ciclo fotoestacionario del O_3). Por tanto, produciendo más O_3 del que ciclo

fotoestacionario predice se debería producir. Este comportamiento se muestra gráficamente en la Figura 2.1.

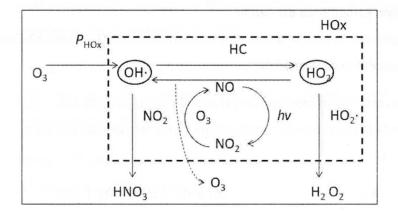


Figura 2.1 Ciclo del O₃ en presencia de HC (Seinfeld y Pandis, 2006)

La producción de O_3 tiene una relación no lineal con las concetraciones de NOx y COV's (Sillman, 1995; Lin *et al.*, 1988). Cuando la primera ruta domina, la producción de O_3 es sensible a concentraciones de NOx, es decir, se incrementa a mayores emisiones de NOx. Cuando la segunda ruta es la que domina, la formación de O_3 es sensible a concentraciones de COV's (Kleinman *et al.*, 2001).

2.3 Modelos de Simulación Ambiental

2.3.1 Modelos de Calidad del Aire

Los modelos de calidad del aire emplean técnicas matemáticas y numéricas para simular los procesos físicos y químicos que afectan a los contaminantes presentes en el ambiente. Basados en datos meteorológicos y de la fuente emisora, así como información del medio físico de la región de interés (topografía y uso del suelo) estos modelos están diseñados para predecir el comportamiento de contaminates primarios y en ciertos casos de contaminantes secundarios que se forman en la atmósfera. Los modelos de calidad de aire pueden ser utilizados, por ejemplo, antes de otorgar permisos de operación a unidades industriales o para verificar que una nueva fuente no excederá los límites permitidos en la ley. Del mismo modo, estos modelos, pueden ser útiles para predecir la concentración de contaminantes provenientes de diversas fuentes antes de implementar una medida regulatoria en una cuenca atmosférica (EPA, 2010).

Los modelos más comúnmente utilizados son los siguientes (EPA, 2010):

- Modelos de dispersión: Estos son tipicamente utilizados antes de la operación de un proceso industrial, para estimar la concentración a nivel del suelo alrededor de la fuente de emisión.
- Modelos fotoquímicos: Estos modelos se utilizan para la evaluación de políticas a nivel de cuencas atmosféricas, urbanas o regionales, que requieren la reducción de emisión en distintas fuentes.
- Modelos receptores: Este modelo se utiliza para cuantificar la contribución de la fuente en la concentración del receptor a través de argumentos meramente estadísticos.

2.3.2 Modelos Eulerianos

Para comprender la utilidad del modelo CMAQ, modelo usado en el estudio aquí reportado, es necesario conocer la evolución que han tenido los modelos eulerianos. Los modelos de calidad del aire eulerianos se comenzaron a utilizar alrededor de 1970, como una extensión de los modelos fotoquímicos de caja y los de dispersión de contaminantes traza (Byun y Schere, 2006).

Los modelos Urban Airshed Model (UAM) y Caltech Air Quality Model (CIT), fueron de los primeros modelos fotoquímicos de malla a escala urbana. Otros modelos se desarrollan con diferentes fines, como estimar la deposición ácida regional o mejorar la compatibilidad entre los modelos meteorológicos y químicos (Byun y Schere, 2006).

Los primeros modelos de calidad del aire trataban cada problema (O₃ troposférico, deposición ácida, evolución de partículas suspendidas, entre otros) de manera aislada. Después, se fue volviendo evidente que las interacciones entre los distintos contaminantes eran importantes en la modelación. Por lo tanto, fue necesario evolucionar a una modelación que incluyera múltiples escalas espaciales y temporales, así como una interacción de múltiples contaminantes, todo de manera simultánea.

2.3.3 Modelo CMAQ

En esta sección se describen los módulos que comprende el sistema de modelación (Figura 2.2) Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ), más adelante se describe el fundamento matemático del modelo.

Este sistema de modelación contiene tres componentes principales: un sistema meteorológico que describe el estado y movimiento atmosférico, el modelo meteorológico de mesoescala de quinta generacion *Fifth-Generation Pennsylvania State University-National Center for Atmospheric Research Mesoscale Model* MM5 versión 3.7 (Grell *et al.*, 1995); modelos de emisión para fuentes naturales y antropogénicas que son descargadas a la atmósfera (conjuntados en el sistema SMOKE – *Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Model*); y un módulo de química y transporte para la simulación de la transformación química y destino de los contaminantes (CMAQ – *Community Multiscale Air Quality Model*).

El módulo de transporte químico (CMAQ) incluye: advección horizontal, advección vertical, ajustes de conservación de masa para los procesos de advección, difusión horizontal, difusión vertical, reacción en fase gaseosa, procesos de transformación gas-partícula, cálculo de reacción fotocatalítica, entre otros.

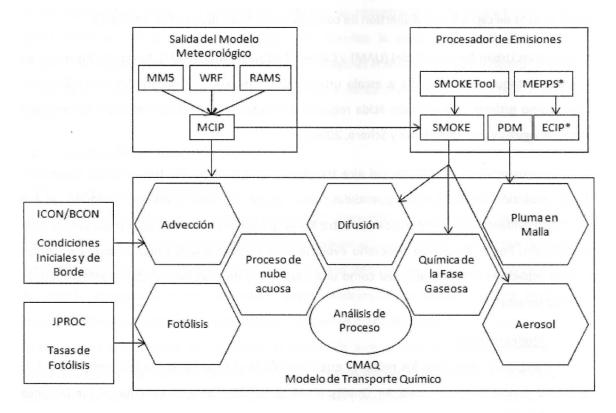


Figura 2.2 Módulos necesarios para ejecutar el CMAQ Models-3 (Byun y Shere, 2006)

2.4 Análisis de Sensibilidad

Es de utilidad tanto para realizar investigación como para proponer políticas regulatorias, determinar no sólo el estado del medio ambiente, sino también la respuesta de éste hacia cambios en los parámetros que lo definen (Napelenok *et al.*, 2008).

El método de la fuerza bruta, el cual se utilizó en este trabajo, ha sido el más utilizado para determinar la sensibilidad de las concentraciones de contaminantes atmosféricos a cambios en las tasas de emisión de sus precursores. El método de la fuerza bruta permite hacer solamente un cambio a la vez en el parámetro de interés y repetir la solución del modelo para dicho cambio (Yang et al., 1997).

En el método acoplado directo, las ecuaciones de sensibilidad son derivadas del modelo y resueltas simultaneamente con las ecuaciones del modelo. Se ha demostrado que este método es inestable e inificiente cuando se aplica a ecuaciones rígidas que se encuentran en muchos problemas (Yang et al., 1997).

Otra técnica para evaluar la sensibilidad es la del adjunto, en la cual los coeficientes de sensibilidad son calculados de las integrales de las funciones de Green, que a su vez son obtenidas a partir del modelo de calidad del aire (Yang *et al.*, 1997).

La otra forma de obtener los coeficientes de sensibilidad es el método desacoplado directo (DDM, por sus siglas en Inglés), en el cual las ecuaciones de sensibilidad se obtienen del modelo de calidad del aire, pero se resuelven de forma independiente al modelo (Yang et al., 1997). El DDM provee una eficiente evaluación de la sensibilidad de las concentraciones en la atmósfera a perturbaciones en las variables de entrada al modelo (Napelenok et al., 2008).

2.5 Investigaciones Anteriores Sobre el Comportamiento de Contaminantes

En la Tabla 2.6, se muestran algunas investigaciones que se han relizado en el campo de la simulación ambiental del fenómeno de la contaminación atmosférica, particularmente en lo que se refiere a la sensibilidad de los niveles de O₃ a cambios en las emisiones de NOx y COV's, teniendo como región de estudio la Zona Metropolitana del Valle de México. En la Tabla 2.6 se presenta un resumen de la técnica utilizada, así como las conclusiones obtenidas en los estudios (Torres-Jardon *et al.*, 2009).

Los trabajos citados en la Tabla 2.6 pretenden buscar cuál es la sensibilidad de O_3 en la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM), que es la ciudad con mayor cantidad de estudios de este tipo en el país. Un aspecto relevante que surge de la comparación de dichos trabajos es que se encuentran diferencias importantes en las conclusiones de estas investigaciones, ya que algunas presentan a la formación de O_3 en la ZMVM como sensible a cambios en la emisión de NOx y otras como sensible a COV's.

Las diferencias en las conclusiones de estos trabajos demuestran las dificultades que se presentan al tratar de predecir el comportamiento de la atmósfera y las respuestas a cambios en emisiones que se presentarían. Estudios de este tipo no se han realizado para el AMM, a pesar de los problemas que se presentan en dicha región, lo cual dá relevancia al estudio que aquí se presenta.

Tabla 2.6 Investigaciones anteriores sobre dispersión de contaminantes

Autores/Año	Resumen	Implicación en sensibilidad O ₃ -NOx-COV en ZMVM	
Los Alamos National Laboratory and IMP (1994)	Uso de OZIMP4 y el modelo fotoquímico CIT para estudiar la formación de ${\rm O_3}$	El estudio concluyó que la formación de O ₃ podría ser sensible a NOx.	
Young et al. (1997)	Utilizó un modelo fotoquímico multicapa de caja y el modelo EKMA para estudiar la producción de O ₃	Concluye que la formación de O ₃ podría ser COV-sensible y que los NOx probablemente se sobreestimaron por un factor de 2.	
Forkel <i>et al.</i> (2004)	Uso el modelo MCCM para probar actuales y futuras estrategias de control de O_3 .	Se observaron resultados correspondientes a un escenario COV-sensible.	
García (2002)	Utiliza el modelo MCCM para evaluar escenarios de cambio de uso de suelo y la eliminación plantas de energía localizadas viento arriba de la ZMVM	Se observaron resultados típicos de un escenario COV-sensible-	
West <i>et al.</i> (2004)	Utilizó el modelo fotoquímico CIT para probar las emisiones de COV en el inventario oficial de la ZMVM contra mediciones ambientales de COV, NOx, y CO.	El estudio sugiere que la formación de O ₃ podría ser sensible a NOx.	
Lei <i>et al.</i> (2006)	Utiliza el modelo CAMx para caracterizar la producción de O ₃ e investigar la sensibilidad ante un cambio en la emisión de precursores.	Concluye que la producción de O₃ puede ser COV-sensible.	
Tie et al. (2008)	Utiliza el modelo WRF-Chem para estudiar la formación de O_3 e investigar la sensibilidad ante variaciones en la emisión de NOx y COV.	Los autores encontraron que la producción de O ₃ en la ZMVM podría ser COV- sensible	
Sandoval <i>et al.</i> (2000, 2001)	Radiación solar a una cámara de smog en exterior para evaluar la máxima formación de O ₃ ante diferentes perturbaciones para diferentes concentraciones de COV y NOx.	Se concluyo que una reducción en NOx resulta en una mayor reducción en picos de O ₃ que una reducción en COV.	
Sosa et al (2000)	Utiliza el enfoque de Indicadores fotoquímicos con los valores de transición recomendados para Norte América para evaluar los radios O ₃ /NOy, O ₃ /NOz, O ₃ /HNO ₃ medidos en la Ciudad de México.	Resultados contradictorios en los indicadores fotoquímicos observados y no permiten concluir cual es el caso de sensibilidad de la Ciudad de México.	
Stephens et al (2008)	Análisis de WE/WD de niveles de monóxido de carbono, NOx, materia particualada secundaria y O ₃ combinada con el concepto de tasa de producción instantánea de O ₃ .	La conclusión de este estudio fue que los fines de semana existe un régimen COV- sensible, mientras que en días de trabajo el comportamiento es NOx, sensible.	

2.6 Inventarios de Emisiones

Un inventario de emisiones es necesario para la aplicación de cualquier modelo de calidad del aire euleriano, ya que a partir de éste se desprende parte de la información utilizada en el proceso de simulación. Una característica del inventario de emisiones es el conteo que se realiza de los diferentes contaminantes que son liberados a la atmósfera en una región determinada (Alvarez, 2004).

Los inventarios de emisión se clasifican en cuatro categorias principales, las cuales al mismo tiempo se pueden subdividir en categorias más específicas (Alvarez, 2004):

- Fuentes puntuales.
- Fuentes móviles.
- Fuentes de área.
- Fuentes naturales.

Las fuentes puntuales son aquellas que están fijas y que dada su magnitud, es importante considerarlas de manera individual. Ejemplos típicos de este tipo de fuente son: plantas químicas, refinerias, plantas de producción de electricidad, entre otros (INE, 2009). Para este tipo de fuentes es común tener registros de emisiones mayores a los 10 Mg anuales de contaminantes totales (SEMARNAT, 2005).

Las fuentes móviles incluyen diversas formas de transporte como: aviones, camiones, vehículos, entre otros. La principal fuente móvil de contaminantes son los vehículos automotores, ya que producen grandes cantidades de CO, y en cantidades menores NOx y COV's (INE, 2009). Esta categoría se divide en vehículos automotores que circulan por carreteras y calles pavimentadas, y fuentes móviles que no circulan por carretera (p. ej., trascabos) (SEMARNAT, 2005).

Por otro lado, las fuentes de área se refieren a pequeñas fuentes puntuales dispersas que individualmente producen una cantidad apreciable de emisiones y que sería difícil incluirlas en un inventario de emisiones de manera individual, pero que en conjunto pueden llegar a alterar la calidad del aire en una región específica (INE, 2009).

Finalmente, las fuentes naturales (también conocidas como biogénicas) son aquellas que produce la naturaleza, ya sea por medio de la vegetación, suelos, volcanes, emisiones geotérmicas entre otras (INE, 2009).

3 METODOLOGÍA

En este capítulo se describe la metodología utilizada para evaluar la sensibilidad de la concentración de O_3 a reducciones en la emisión de NO_x y COV's en la región de interés. La evaluación se realizó para un episodio de alta contaminación atmosférica en el AMM. La metodología utilizada se muestra en la descripción de la Figura 3.1.

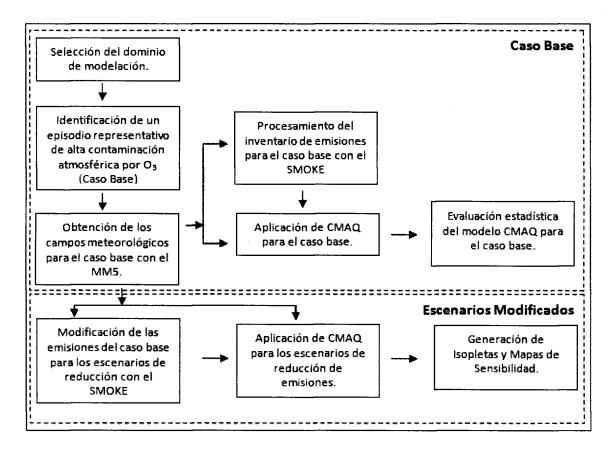


Figura 3.1 Diagrama de la metodología para evaluar la sensibilidad de la concentración de O₃ a cambios en la emisión de NOx y COV′s

En la Figura 3.1 se presentan los pasos que se siguieron para la evaluación de la sensibilidad de la concentración de O_3 a cambios en la emisión de NO_x y COV's. A lo largo de este capítulo se describen cada una de las etapas necesarias para llevar a cabo éste análisis.

3.1 Selección del Episodio de Modelación

Es necesario seleccionar un episodio que presente altas concentraciones de O₃ y condiciones meteorológicas similares. Esto es conveniente para asegurar la representatividad de los resultados obtenidos. En otras palabras, para asegurar que las altas concentraciones de O₃ fueron causadas por condiciones atmosféricas similares y no por otros factores independientes a esta variable. Así, los resultados del episodio se pueden catalogar como representativos de otros episodios con altos niveles de O₃ cuyo origen sean condiciones meteorológicas similares.

La técnica de análisis estadístico por árboles de clasificación y regresión (Classification and Regresion Tree Analysis, CART) agrupa una base de datos en subgrupos basados en el valor de una variable definida por el usuario a través de un proceso de partición binaria recursiva (Brieman et al., 1984). La técnica CART es capaz de segregar objetos o días con diferentes valores de variables de clasificación en distintos grupos o nodos terminales. CART posee la capacidad de capturar la nolinealidad de las relaciones existentes en bases de datos complejas, generando árboles de decisión basados en preguntas de respuesta simple, sí ó no. CART inicia con un nodo raíz, del cual, a partir de una serie de preguntas sí/no, se generan nodos descendentes. Algunos de estos nodos son nodos terminales, lo que significa que se ha alcanzado una clasificación final, mientras que el resto de los nodos continúan dividiéndose hasta llegar a un nodo terminal. Cada división separa un nodo madre en dos nodos hijos basándose en la ocurrencia o no de una condición sobre una variable particular. El análisis se realiza en forma recursiva hasta terminar la clasificación con el menor error estadístico posible dadas ciertas restricciones impuestas al proceso de clasificación (p. ej., máximo número de elementos en un nodo terminal). Esta técnica ha sido empleada con éxito anteriormente para definir episodios de modelación en estudios de calidad del aire (p.ej., Hudischewshyi y Douglas, 1997).

La variable que se definió en este trabajo como la de decisión fue la concentración máxima diaria de O₃, y las variables independientes en este caso fueron la temperatura máxima y promedio diaria, humedad relativa promedio diaria, velocidad de viento promedio diaria y dirección del viento promedio diaria. Se seleccionó el episodio utilizando los datos del año 2005 provenientes de la estación del SIMA ubicada en Santa Catarina. Esta estación es la que presenta violaciones a las normas oficiales mexicanas de calidad del aire con mayor frecuencia en el AMM.

3.2 Meteorología: el MM5

3.2.1 Descripción del Modelo

El MM5 es un modelo tridimensional con dinámica no-hidrostática lo que permite la representación eficaz de fenómenos meteorológicos en la mesoescala (2-4 km a cientos de kilómetros). MM5 resuelve en una malla horizontal las ecuaciones primitivas para termodinámica, conservación de momentum y humedad. En el Apéndice A se muestra la nomenclatura utilizada a lo largo de este trabajo. Las variables de estado pronosticadas son temperatura (7), humedad específica, campo de viento y presión (p). Dichas variables de estado se definen en términos de un estado de referencia constante y una perturbación que es la que se estima (Dudhia, 1993):

$$p(x, y, z, t) = p_0(z) + p'(x, y, z, t)$$

$$T(x, y, z, t) = T_0(z) + T(x, y, z, t)$$

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

El sistema de coordenadas utilizado por MM5 es (x, y, sigma-p). Las dimensiones x y y conforman una rejilla rectangular de puntos espaciados equidistantemente, formando filas y columnas. Sigma representa una coordenada vertical, sobre el nivel del suelo, que es función de la presión del estado de referencia, de la presión superficial en cada punto y la presión en el límite superior del modelo. Sigma tiene un valor de 1 en la superficie y un valor de 0 en el límite superior del modelo. El uso de las coordenadas sigma permite la obtención de datos de los parámetros a distintas alturas seleccionadas, y no en niveles de presión como ocurre en otros modelos. La influencia de la topografía en la estructura de niveles sigma disminuye conforme aumenta la altura, de tal forma que los niveles sigma superiores son casi paralelos.

Típicamente el perfil de temperatura para el estado de referencia consiste en una función analítica que se ajusta al perfil de temperatura troposférico. La coordenada vertical σ se puede definir entonces a partir de la presión de referencia (p_0):

$$\sigma = \frac{p_0 - p_t}{p_s - p_t}$$

donde:

$$p_t \leq p_0 \leq p_s$$

$$0 < \sigma \le 1$$

donde p_s y p_t representan la presión en la superficie y en el límite vertical del estado de referencia, respectivamente, y son independientes del tiempo. La presión total en un determinado punto está dado por:

$$p = p^* \sigma + p_t + p'$$

donde $p^*(x,y) = p_s(x,y) - p_t$. La perturbación tridimensional de presión, p', es una cantidad pronosticada. A partir de esta definición, se desprenden las ecuaciones fundamentales del modelo, las cuales se describen a continuación (Dudhia, 1993).

<u>Gradiente de presión</u>: La ecuación de gradiente de presión resulta de combinar la ecuación de continuidad con la primera Ley de la Termodinámica y la Ley del Gas Ideal.

$$\frac{\partial p'}{\partial t} - \rho_0 g w + \gamma p \nabla \cdot v = - v \cdot \nabla \dot{p} + \frac{\gamma p}{T} \left(\frac{\dot{Q}}{c_p} + \frac{T_0}{\theta_0} D_{\theta} \right)$$

<u>Conservación de Momentum</u>: Estas ecuaciones consideran la "fuerza de Coriolis", la cual desvía los patrones de viento por el efecto de la rotación terrestre (viento geostrófico).

Componente x:

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + \frac{m}{\rho} \left(\frac{\partial p'}{\partial x} - \frac{\sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} \frac{\partial p'}{\partial \sigma} \right) = -\boldsymbol{v} \cdot \nabla u + \boldsymbol{v} \left(f + u \frac{\partial m}{\partial y} - v \frac{\partial m}{\partial x} \right) - ew \cos \alpha - \frac{uw}{r_{Tierra}} + D_u$$

Componente y:

$$\frac{\partial v'}{\partial t} + \frac{m}{\rho} \left(\frac{\partial p'}{\partial y} - \frac{\sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial y} \frac{\partial p'}{\partial \sigma} \right) = -v \cdot \nabla u + u \left(f + u \frac{\partial m}{\partial y} - v \frac{\partial m}{\partial x} \right) - ew \operatorname{sen} \alpha - \frac{vw}{r_{Tierra}} + D_v$$

Componente z:

$$\frac{\partial w'}{\partial t} - \frac{\rho_0}{\rho} \frac{g}{p^*} \frac{\partial p'}{\partial \sigma} + \frac{g}{\gamma} \frac{p'}{p} = -v \cdot \nabla w + g \frac{p_0}{p} \frac{T^*}{T_0} - \frac{gR_d}{c_p} \frac{p'}{p} + e(u\cos\alpha v\sin\alpha) + \frac{u^2 + v^2}{r_{Tierra}} + D_w$$

Donde D_u , D_v y D_w son los términos de advección, los cuales pueden expandirse de la siguiente manera:

$$\boldsymbol{v} \cdot \nabla A \equiv mu \frac{\partial A}{\partial x} + mv \frac{\partial A}{\partial y} + \dot{\sigma} \frac{\partial A}{\partial \sigma}$$

La velocidad vertical se representa por:

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

y la divergencia se refiere a la expansión de un vector de campo:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = m^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u}{m} \right) - \frac{m\sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial \sigma} - \frac{\rho_0 g}{p^*} \frac{\partial w}{\partial \sigma}$$

Finalmente, la ecuación de balance energético resulta de la aplicación de la primera ley de la termodinámica:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\boldsymbol{v} \cdot \nabla + \frac{1}{\rho c_p} \left(\frac{\partial p'}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla \dot{p} - \rho_0 g w \right) + \frac{Q}{c_p} + \frac{T_0}{\theta_0} D_{\theta}$$

En el término de intercambio de calor (Q) se incluyen los efectos de la adición de energía por radiación solar, flujo de calor sensible proveniente de la superficie, entre otros fenómenos de intercambio energético.

El modelo utiliza un esquema de integración semi-implícita temporal-espacial. De manera particular, se emplea un esquema semi-implícito basado en Klemp y Wilhelmson (1978) para la diferenciación temporal, el cual se utiliza para controlar las oscilaciones en la solución del modelo. Esto se discute en forma detallada en Grell *et al.* (1994) y Dudhia *et al.* (1998).

MM5 posee capacidad de anidamiento múltiple con interacción en ambas direcciones entre los dominios anidados, facilitando el estudio de fenómenos atmosféricos bajo distintas escalas espaciales y a distintas resoluciones. Así mismo, MM5 cuenta con una amplia gama de parametrizaciones para los distintos procesos físicos que se llevan a cabo en la atmósfera, tales como, de capa planetaria límite, radiación atmosférica, microfísica de nubes y precipitación, convección por cúmulos, turbulencia, flujos de momentum y energía sobre la superficie terrestre, intercambios en los límites del modelo, entre otros. Algunos de estos procesos ocurren en una escala tan pequeña que no pueden ser resueltos en forma satisfactoria por el modelo a través de

las ecuaciones primitivas, para lo cual los esquemas de parametrización apoyan en la modelación de dichos fenómenos.

MM5 también cuenta con la capacidad de asimilación de datos, lo cual le permite incorporar observaciones meteorológicas para mejorar los resultados obtenidos. La técnica de asimilación de datos utilizada por el MM5 se basa en la relajación newtoniana descrita por Stauffer y Seaman (1990), Seaman *et al.* (1995) y Shafram *et al.* (1992).

3.2.2 Aplicación del MM5 al episodio de modelación

Los datos de entrada al MM5 incluyen: topografía, límites tierra-agua, uso de suelo y tipo de vegetación, temperatura a nivel del mar, observaciones meteorológicas en superficie y radiosondeos para establecer condiciones iniciales, condiciones frontera y asimilaciones de datos a diferentes intervalos de tiempo. La salida del MM5 es una descripción en cuatro dimensiones (espacio más tiempo) del estado de la atmósfera y el suelo, si es que se requiere este último. Algunas variables típicas son temperatura, campo de viento, presión, humedad, altura de la capa de mezclado, y una gran variedad de datos derivados a partir de estas variables.

Para la especificación de los datos de entrada al modelo se emplearon las bases de datos del Centro Nacional para la Investigación Atmosférica (NCAR, National Center for Atmospheric Research) de los EE.UU., a las cuales se tuvo acceso a través de la Data Support Section of Scientific Computing Division de NCAR. Información topográfica y de uso de suelo y cobertura vegetal se obtuvo a resoluciones de 10 min (~19 km), 5 min (~9 km), 2 min (~4 km) y 30 seg (~0.9 km). Las condiciones iniciales y de frontera se obtuvieron de la base de datos NCAR/NCEP Eta Data. Los archivos NCEP Eta Data consisten en análisis regionales para Norteamérica basados en el modelo Eta, que genera información cada 12 horas. La información se encuentra mallada en 2 y 3 dimensiones, y contiene un archivo de los análisis para parámetros meteorológicos tales como velocidad de viento, temperatura, humedad, fracción de nubes, y series de tiempo horarias para alrededor de 600 estaciones meteorológicas en Norteamérica.

Para el caso particular de la especificación de las condiciones frontera laterales se utilizó la opción de condiciones frontera relajadas, donde las filas y columnas más externas están especificadas para un determinado tiempo, los siguientes cuatro valores se relajan con respecto a los valores frontera utilizando una constante de relajación que decrece linealmente conforme éstos se alejan de la frontera. Las condiciones frontera laterales del dominio más externo se derivaron a partir de

los análisis contenidos en el *NCEP Eta Data*. Para las simulaciones efectuadas se seleccionó la opción de comunicación entre los dominios anidados de interacción en una vía (*one-way nesting*), bajo la cual las condiciones de frontera para los dominios anidados se interpolan a partir de la simulación del dominio madre.

Los análisis meteorológicos suelen ser de baja resolución, impidiendo capturar adecuadamente los fenómenos atmosféricos de escala fina presentes en las zonas urbanas. Por esta razón, resulta indispensable agregar información adicional en forma de observaciones al modelo con las cuales se pueda efectuar adecuadamente el proceso de asimilación de datos. El conjunto de observaciones base para este proceso se tomó de la base de datos del *NCAR Scientific Computing Division Data Support Section*, la cual contiene reportes de observaciones provenientes de estaciones meteorológicas terrestres, marinas, y sondeos aéreos, archivados cada 6 horas. Además, se incorporó información meteorológica derivada de los reportes de las estaciones de calidad del aire del SIMA en el AMM.

Como se comentó previamente, MM5 cuenta con una amplia gama de parametrizaciones para los distintos procesos físicos que tienen lugar en la atmósfera y que por su complejidad no pueden ser resueltos a partir de la resolución de las ecuaciones primitivas. Con base en trabajos previos (Olerud y Sims, 2003; Morris et al., 2004; Vanoye y Mendoza, 2009) se seleccionaron los esquemas de parametrización reportados en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1 Esquemas de parametrización empleados en las aplicaciones del MM5

Identificador del parámetro (MM5)	Descripción	Opción seleccionada
IMPHYS	Esquema para el tratamiento explícito de la humedad	Mix Phase (fase mixta)
MPHYSTBL	Exponente intrínseco para el cálculo de IMPHYS	Emplear tabla de búsqueda (look-up table)
ICUPA	Esquema para nubes cumulus	Esquema Grell
IBLTYP	Tratamiento de la capa límite planetaria (Planetary Boundary Layer)	Esquema de Pleim-Xiu
FRAD	Enfriamiento radiativo de la atmósfera	Modelo RRTM (Rapid Radiative Transfer Model)
ISOIL	Modelo para el tratamiento de la temperatura de las multicapas del suelo	Modelo PXLS (<i>Pleim-Xiu Land</i> Surface Model)
ISHALLO	Opción para el tratamiento de convección a baja altura	Deshabilitada

Finalmente, los datos de los campos meteorológicos que se obtuvieron del MM5 fueron post procesados con la aplicación MCIP. MCIP incorpora un número de algoritmos físicos y dinámicos para preparar campos meteorológicos de dos y tres dimensiones en formato de netCDF para el posterior procesamiento de las emisiones y las simulaciones del transporte químico (Byun *et al.*, 1999).

3.2.3 Evaluación estadística del desempeño del modelo meteorológico

Una vez obtenidos los datos meteorológicos para el episodio seleccionado, es necesario evaluar el desempeño del modelo, comparando los datos obtenidos de éste contra mediciones en el dominio definido. Con ello se puede analizar la certeza con la cual el modelo está reproduciendo el estado real de la atmósfera. Las comparaciones estadísticas que se consideraron fueron la media (*M*), el sesgo (*B*), el error neto (*E*), la raíz cuadrada del error cuadrado medio (*RCECM*) y el índice de ajuste (*IA*). La descripción de estos estadísticos se presenta en la Tabla 3.2. Detalles adicionales se pueden encontrar en Emery *et al.* (2001).

Tabla 3.2 Estadísticos utilizados para la evaluación del MM5 (Emery et al., 2001)

Estadístico	Forma de calcularlo	Descripción
Observación promedio	$M_{o} = \frac{1}{IJ} \sum_{j=1}^{J} \sum_{i=1}^{I} O_{j}^{i}$	Se calcula con el promedio de todos los sitios con información válida dentro de una región y periodo de tiempo definidos.
Predicción promedio	$M_{p} = \frac{1}{IJ} \sum_{j=1}^{J} \sum_{i=1}^{I} P_{j}^{i}$	Es el promedio de los resultados de la simulación que se interpolan para cada una de las observaciones utilizadas en el cálculo de la observación promedio.
Sesgo	$B = \frac{1}{IJ} \sum_{j=1}^{J} \sum_{i=1}^{I} (P_{j}^{i} - O_{j}^{i})$	Consiste en la diferencia promedio entre los pares de pronósticos y observaciones con información válida para una región y tiempo determinados.
Error neto	$E = \frac{1}{IJ} \sum_{j=1}^{J} \sum_{i=1}^{I} P_{j}^{i} - O_{j}^{i} $	Calculado como la diferencia promedio absoluta entre los pares de predicciones y observaciones con información válida para una región y tiempo determinados.
Raíz cuadrada del error cuadrado medio	$RCECM = \left[\frac{1}{IJ} \sum_{j=1}^{J} \sum_{i=1}^{I} (P_{j}^{i} - O_{j}^{i})^{2}\right]^{1/2}$	Se calcula como la raíz cuadrada de la diferencia promedio entre los pares de predicciones-observaciones.
Índice de ajuste	$IA = 1 - \left[\frac{IJ \cdot RCECM^2}{\sum_{j=1}^{J} \sum_{i=1}^{I} \left P_j^i - M_o \right + \left O_j^i - M_o \right } \right]$	Consiste en la razón entre el RCECM total y la suma de la diferencia entre cada pronostico y la observación promedio, y la diferencia de cada observación y la observación promedio.

Nota: Donde P_j^i y O_j^i representan los valores de las predicciones y las observaciones en el punto i en el momento j Las sumatorias se realizan sobre todos los sitios (l) y sobre todos los periodos de tiempo (J).

Como guía para establecer el grado de desempeño del modelo se utilizaron los criterios derivados por Emery et al. (2001). En dicho estudio se compilaron los resultados del desempeño estadístico de alrededor de 30 modelaciones meteorológicas a lo largo de todo el territorio de los EE.UU. El propósito de dicha compilación fue establecer criterios homologados para establecer cuando el rendimiento de una modelación meteorológica se puede considerar aceptable. Los criterios se resumen en la Tabla 3.3. Para establecer estos parámetros se utilizó un enfoque similar al utilizado por la USEPA para fijar los criterios de desempeño para un modelo fotoquímico (EPA, 1991).

Tabla 3.3 Criterios guía para la evaluación estadística del desempeño del modelo MM5 (Emery et al., 2001)

Parámetro Meteorológico	Parámetro estadístico	Criterio
Velocidad de viento	RCECM	≤2 m/s
	IA	≥0.6
Dirección de viento	Error neto	≤20 grados
Temperatura	Error neto	≤2 K
	Sesgo	±0.5 K
	IA	≥0.7
Humedad	Error neto	≤2 g/kg
	Sesgo	±1 g/kg
	IA	≥0.7

3.3 Inventarios de Emisiones

Es necesario contar con un inventario de emisiones para poder utilizar el modelo CMAQ. Para el caso de esta investigación, los datos se procesaron de distintas maneras para las áreas correspondientes a México y Estados Unidos utilizando el sistema de procesamiento SMOKE (Lin et al., 2005).

SMOKE es un sistema computacional que permite generar inventarios de emisiones distribuidos espacial y temporalmente en una malla computacional que puedan ser leídos posteriormente por modelos de calidad del aire como CMAQ. Tal cual, SMOKE no es un modelo de generación de emisiones. Su tarea principal es conjuntar y distribuir espacial y temporalmente las emisiones de fuentes puntuales, biogénicas, móviles y de área, además de realizar el proceso de "especiación química" de las emisiones de COV's. La generación de emisiones, por ejemplo de fuentes biogénicas, se logra a través de llamados internos que realiza SMOKE a los modelos específicos de estimación de emisiones, los cuales proveen su información de salida a SMOKE el cual a su vez realiza los procesos de especiación y ubicación temporal y espacial.

Información base para generar el inventario de emisiones por fuentes antropogénicas del lado estadounidense del dominio de modelación se obtuvo del Inventario de Emisiones Nacional del 2005 (2005 US National Emissions Inventory, NEI) preparado para el Clean Air Interstate Rule (CAIR). Dicha información está disponible en el sitio web de la US EPA. Para México, se utilizó el

Inventario Nacional de Emisiones 1999 (SEMARNAT, 2006) y el inventario de emisiones 2005 del AMM (SEMARNAT y Gobierno de Nuevo León, 2009) para generar las emisiones de origen antropogénico. Las emisiones de los municipios pertenecientes al AMM se aplicaron directamente de la base de datos obtenida. El proceso para generar los datos de las emisiones del resto de la región noreste de México para el año 2005 involucró primero calcular un factor de incremento entre las emisiones de 1999 y 2005 para el AMM por fuente y por contaminante. Posteriormente, este factor de escalamiento se aplicó a las emisiones del resto de los municipios dentro del dominio de modelación, cuya base de estimación era 1999. Con este proceso se está realizando una suposición gruesa de que toda la región Noreste tuvo una dinámica socioeconómica parecida a la experimentada por el AMM en el periodo de 1999 a 2005. Esto se realizó de la manera indicada a falta de mayor información.

Las emisiones de fuentes móviles del lado mexicano se obtuvieron como totales por municipio, por lo que no fue necesario correr un modelo del tipo MOBILE o MOVES para dicha categoría de emisiones del lado mexicano. Las principales fuentes puntuales mexicanas en la región se encuentran segregadas en la base de datos por lo que si fue posible ubicarlas en sus coordinadas geográficas reales (principalmente plantas de generación de energía eléctrica); lo mismo ocurrió con las emisiones de las principales fuentes puntuales del lado estadounidense. Las emisiones por fuentes móviles del lado estadounidense del dominio se prepararon ejecutando el modelo MOBILE6 empleando las "banderas" de ejecución estándar recomendadas por la USEPA para inventarios de los EE.UU. (US EPA, 2003). Las emisiones biogénicas para todo el dominio de modelación se estimaron usando el modelo BEIS3 de la USEPA (Vukovich y Pierce, 2002). Cabe mencionar que tanto MOBILE6 como BEIS3 emplean información meteorológica para realizar sus estimaciones. Por ejemplo, MOBILE6 requieren valores de temperatura para estimar emisiones evaporativas. Dicha información se alimentó de los resultados de la ejecución del MM5.

Para la distribución temporal de las emisiones por fuentes móviles, puntuales y de área procesadas por SMOKE se emplearon los perfiles temporales predefinidos por el sistema computacional para dichas fuentes. Para la distribución espacial de las fuentes móviles y de área del lado estadounidense, se emplearon los surrogados predefinidos por la US EPA. Para el lado mexicano solamente se empleó como surrogado la densidad poblacional. Finalmente, la especiación de los COVs se basó también en perfiles predefinidos por la US EPA para las diferentes clases de fuentes de emisión, considerando que la versión de CMAQ especificada empleó el

mecanismo fotoquímico CB-V para tratar las rutas de reacción de dicho conjunto de especies químicas.

3.4 Modelación de la Calidad del Aire: el CMAQ

En la Sección 2.3.3 se realizó una breve introducción al sistema de modelación que se empleó en este trabajo para estudiar la respuesta de las concentraciones ambientales de O_3 a cambios en emisiones de NOx y COVs. El corazón de dicho sistema es el CMAQ, el cual es el modelo que realiza la incorporación de los campos meteorológicos y emisiones a la atmósfera para realizar las estimaciones del transporte y transformación de contaminantes atmosféricos dentro del dominio de modelación.

CMAQ es un modelo fotoquímico Euleriano multiescala de tercera generación de los conocidos como modelos "una atmósfera" ya que tiene la capacidad de seguir la dinámica de contaminantes atmosféricos en fase gaseosa y aerosol, además de que incorpora procesos de depositación en seco y húmeda dentro de sus procesos de remoción (Byun y Ching, 1999). Al igual que otros modelos fotoquímicos, CMAQ resuelve la ecuación de conservación de especies químicas para todas las especies de interés:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}C_i) + \nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla C_i) + R_i + E_i$$

donde C_i es la concentración de la especie química i, \mathbf{u} es el campo de viento advectivo (tridimensional), \mathbf{K} es el tensor de difusividad turbulenta, R_i es la velocidad neta de producción química de la especie i, y E_i es la tasa de emisión por fuentes puntuales de la especie i. Los parámetros meteorológicos, como \mathbf{u} , \mathbf{K} , la temperatura empleada para cuantificar las constantes de velocidad de reacción y la humedad son proveídos por el MM5, mientras que las tasas de emisión E_i las provee SMOKE. Las emisiones del resto de las fuentes de emisión (biogénicas, móviles y de área) son alimentadas al modelo a través de la condición de frontera a nivel de piso. Las condiciones de iniciales y de borde se especificaron como condiciones de "aire limpio" según perfiles de concentración precargados en CMAQ. Los archivos de dichas condiciones iniciales y de borde se obtienen al correr dos módulos del CMAQ, bcon e icon. Cabe comentar que para el primer día de simulación las condiciones iniciales se especificaron utilizando el perfil disponible en CMAQ. Para los días posteriores se utiliza la concentración predicha al final del día previo.

En la versión del CMAQ empleada en esta aplicación, se especificó el mecanismo químico *Carbon-Bond* V (CB-V) para resolver la química atmosférica en fase gaseosa. La lista de especies o pseudoespecies químicas utilizada por el mecanismo químico CB-V se muestra en el Apéndice B (Yarwood *et al.*, 2005). CMAQ utiliza un método de separación de operadores para resolver numéricamente la ecuación de continuidad, de tal manera que el transporte horizontal y vertical se resuelven con diferentes operadores secuenciados. En esta aplicación se empleó el algoritmo de advección de Bott (Bott, 1989) para el tratar el transporte advectivo. La difusión turbulenta horizontal se resuelve empleando un método de diferencias finitas explícito con un paso de integración suficientemente pequeño para asegurar soluciones positivas. Para el caso de la difusión turbulenta vertical, se empleó el Modelo Asimétrico Convectivo (*Asymmetric Convective Model*, ACM) (Pleim y Chang, 1992).

Con base en la información generada por las aplicaciones de MM5 y SMOKE, y las especificaciones descritas arriba, se realizó la aplicación del CMAQ al caso base de simulación. Al igual que en el caso de la aplicación del MM5, la revisión del desempeño del CMAQ en el caso base sirve para comprobar que el modelo CMAQ reproduce de manera adecuada las concentraciones en el episodio seleccionado. Esto es en particular importante ya que si el comportamiento del modelo es razonablemente bueno, entonces los análisis posteriores estarán sustentados en una aplicación del modelo confiable.

3.4.1 Evaluación estadística del desempeño del modelo fotoquímico

Así como se evaluó el desempeño estadístico del modelo meteorológico, fue necesario evaluar el del modelo fotoquímico, para conocer la certeza con la cual se está reproduciendo la concentración real de O₃ en el caso base.

Para el caso del CMAQ, los estadísticos evaluados fueron la exactitud de predicción del pico máximo (EPP), la desviación promedio normalizada (DPN), el error bruto normalizado promedio (EBNP), desviación normalizada promedio (DNP) y el error normalizado promedio (ENP). Se presenta una descripción en la Tabla 3.4, información más detallada puede encontrarse en EPA (1991) y USEPA (2008).

Tabla 3.4 Criterios guía para la evaluación estadística del desempeño del modelo CMAQ. (EPA, 1991; USEPA, 2008)

Exactitud de la predicción del pico máximo. Cuantifica la habilidad del modelo para reproducir, en tiempo y espacio, la máxima concentración durante cada día del episodio. Desviación promedio normalizada. Un signo negativo indica subestimación de los datos.
signo negativo indica subestimación de los
1 22.00.
Error bruto normalizado promedio. Indica el error absoluto de las estimaciones obtenidas.
Desviación normalizada promedio. Este estadístico promedia la diferencia (Predicción - Observación) contra la suma de los valores observados.
Error normalizado promedio. Calcula el valor absoluto de la diferencia (Predicción - Observación) sobre la suma de los valores observados.

Para corroborar el correcto desempeño del modelo fotoquímico, se compararon los resultados obtenidos para los estadísticos mostrados en la Tabla 3.4 contra las guías disponibles en EPA (2001), las cuales se muestran en la Tabla 3.5, y los resultados obtenidos en distintas evaluaciones estadísticas en un estudio presentado en USEPA (2008).

Tabla 3.5 Guías para evaluar el desempeño de un modelo fotoquímico (EPA, 2001).

Estadístico	Criterio Menor	Criterio Mayor			
EPP	±15%	±20%			
DPN	±5%	±15%			
EBNP	30%	35%			

Si todas las mediciones estadísticas están dentro de los rangos permitidos, y el desempeño gráfico tiene resultados considerados en un rango aceptable, entonces se puede decir que el modelo fue ejecutado con éxito.

3.5 Escenarios de Reducción

Una vez generado y analizado el caso base, se evaluaron los escenarios de reducción de emisiones de NOx y COVs siguiendo los mismos pasos utilizados para procesar la información del caso base. Las modificaciones entre los diferentes escenarios se realizan exclusivamente en el sistema de procesamiento de emisiones SMOKE. Para determinar los escenarios de reducción a evaluar se utilizó un método similar al empleado por Milford *et al.* (1989). Los escenarios propuestos conllevan cambios en las emisiones que se estima son tecnológicamente alcanzables (reducciones globales de hasta 50% en las emisiones). En la Figura 3.2 se muestra un esquema de los escenarios de reducción que se evaluaron. En estos escenarios se buscó indagar exclusivamente la respuesta del cambio de concentraciones de O₃ a cambios en las emisiones del lado Mexicano del dominio de modelación. Es decir, en todos los escenarios, las emisiones del lado estadounidense permanecieron sin cambio. Así mismo, los cambios en emisiones se aplicaron de igual manera a las emisiones generadas en el AMM y en el resto de la zona Noreste del país. Es decir, se hace la suposición que el mismo cambio tecnológico se lleva a cabo en toda la región evaluada.

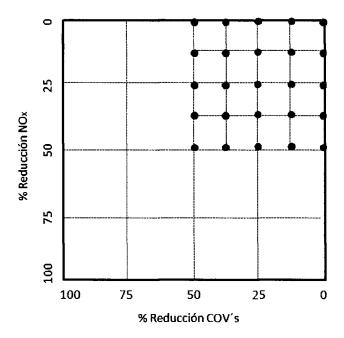


Figura 3.2 Combinaciones de % de reducción de emisiones de NOx y COV´s (●) para los cuales fue evaluada la concentración de O₃. La esquina superior derecha representa el caso base.

3.6 Herramientas de análisis de resultados de los escenarios de reducción

Para el análisis de los resultados de los escenarios de reducción de emisiones se emplean dos herramientas principales: construcción de isopletas de ozono y mapas comparativos de diferencia entre el caso base y el escenario de reducción.

3.6.1 <u>Isopletas de Ozono</u>

Las isopletas de Ozono, permiten analizar de manera gráfica la sensibilidad de la concentración máxima diaria de O₃ a cambios en la emisión de sus precursores, NOx y COV's, en un determinado punto geográfico. Las isopletas se construyeron con la información generada por el modelo fotoquímico CMAQ y para un punto de interés en un momento especifico. En este caso se optó por generar estos gráficos para las celdas correspondientes a las ubicaciones de las estaciones meteorológicas del SIMA, que se encontraban disponibles en el año 2005.

Para cada ubicación seleccionada, se obtuvo la máxima concentración de O₃, para el caso base y para los distintos escenarios. Después, estos datos son graficados de tal forma que en el eje vertical se tiene la reducción de emisión de NOx, y en el eje horizontal la de COV's. La parte superior derecha corresponde a 100% de emisión de precursores de O₃, es decir el caso base, y disminuyendo hacia abajo a la izquierda. El cuerpo de la gráfica contiene las concentraciones máximas de O₃ para cada combinación.

Con estas gráficas es posible sugerir cual de los escenarios evaluados es el que minimiza la concentración máxima de O_3 en la región. Por ende hacer las recomendaciones necesarias de las políticas adecuadas para alcanzar una calidad de aire adecuada en el AMM con lo que respecta a la concentración de O_3 . Así mismo, permiten identificar el nivel de no-linealidad en la respuesta de la concentración de O_3 a los cambios de emisiones propuestos. Finalmente, esta herramienta puede sugerir el estado químico que gobierna la producción de O_3 en cada ubicación geográfica (es decir, limitado por NOx o limitado por COV's).

3.6.2 <u>Mapas comparativos de diferencia entre el caso base y los principales escenarios de reducción</u>

Una manera de conocer el impacto de las estrategias de control, en este caso representados con los escenarios de reducción, es con la curvas isopletas, presentadas en la sección anterior. Sin embargo, de esa forma sólo es posible observar los efectos de los cambios propuestos en puntos específicos.

En esta sección se describe un método distinto para observar los efectos que tienen las estrategias en la concentración de O₃. Consiste en generar mapas del dominio de modelación, en los cuales la característica observada son las diferencias de concentración entre el caso base y el escenario de reducción a cierta hora del día. En este caso, los mapas de diferencia fueron construidos para la hora en que ocurrió el máximo de O₃ para el caso base, con el fin de hacerlos comparables en espacio y tiempo.

Tabla 3.6 Escenarios de reducción para los cuales se generaron mapas de diferencia

Escenario	% de emisión de COV's con	% de emisión de NOx con		
	respecto al Caso Base	respecto al Caso Base		
1	100	100		
2	75	100		
3	75	75		
4	100	75		
5	50	100		
6	50	75		
7	50 50			
8	75	50		
9	100	50		

Finalmente, es este análisis solamente se contemplaron los casos específicos de 8 escenarios en particular, presentados en la Tabla 3.6. Los escenarios mostrados son los más representativos de los propuestos, ya que cubren el rango completo de las reducciones analizadas.

4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

En este capítulo se presentan los resultados mas relevantes obtenidos al aplicar la metodología descrita en la sección anterior, así como una discusión de cada uno de tales resultados. Los datos mostrados ayudaran a alcanzar los objetivos trazados en el capítulo primero. Se presentan:

- Selección del dominio de modelación.
- Selección del episodio a modelar por medio de la técnica de árboles de regresión.
- Evaluación estadística de los resultados obtenidos por el modelo meteorológico.
- Evaluación estadística de las concentraciones de O₃ obtenidas por medio del CMAQ contra las observadas en las estaciones de monitoreo del AMM durante el espisodio. Con este fin, también se presentan las series de tiempo y diagragamas de dispersión para cuatro estaciones de monitoreo del AMM.
- Isopletas de O₃ para las estaciones de monitoreo del AMM.
- Por último, se presentan los mapas comparativos de diferencia entre el caso base y el escenario de reducción, los cuales permiten observar los efectos de las estrategias propuestas a lo largo y ancho del dominio de modelación definido.

4.1 Selección del dominio de modelación

Se definieron tres dominios de modelación para la aplicación del MM5. El tercero se utilizó para la aplicación del modelo CMAQ, tanto para el caso base como para los escenarios de control de emisiones. El anidamiento permite considerar patrones meteorológicos de gran escala que pudieran influir en los campos meteorológicos regionales. Cabe resaltar que la resolución horizontal se incrementa conforme se anidan los dominios de modelación. El primer dominio (DO1), con celdas de 72 km por 72 km en la horizontal, cubre el territorio continental de Estados Unidos de América, México, Cuba así como parte de Canadá y Centro América (Figura 4.1).



Figura 4.1 Dominio de modelación DO1 y anidamiento de los dominios DO2 y DO3.

El segundo dominio (DO2) cubre el sur de Estados Unidos, todo el territorio mexicano y parte de Cuba y Centro América (Figura 4.2). Las celdas de este domino tienen una definición horizontal de 24 km por 24 km.

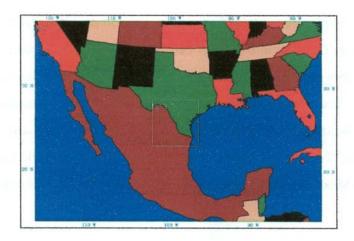


Figura 4.2 Dominio de modelación DO2 y anidamiento del dominio DO3.

Finalmente, el tercer dominio (DO3) cubre parte del noreste de México y el sur de Texas (Figura 4.3). En el noreste mexicano cubre el AMM en Nuevo León; Monclova, Piedras Negras y Saltillo en el estado de Coahuila; Nuevo Laredo, Reynosa y Matamoros en Tamaulipas y las ciudades de

Corpus Christi, Laredo y San Antonio en el estado de Texas, por mencionar las más importantes. Las celdas de este dominio tienen un tamaño de 8 km por 8 km, en la horizontal. Otros estudios sobre sensibilidad de O₃ han utilizado una definición horizontal similar (Geng *et al.*, 2007), (Bell y Ellis, 2004), (Lin *et al.*, 2005) entre otros. Cabe destacar que las fronteras del DO3 se colocaron a una distancia suficiente del AMM (6 celdos, equivalentes a 48 km) tal que se evitaran los efectos de borde.

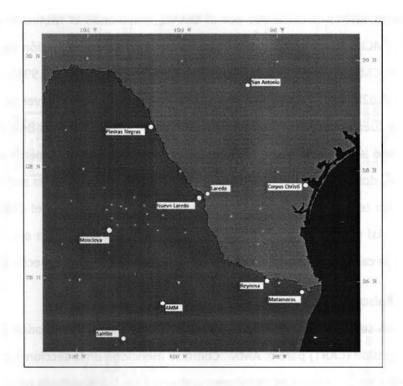


Figura 4.3 Dominio de modelación DO3 y ubicación de las principales zonas urbanas dentro del mismo.

El dominio madre (DO1) utilizado en este trabajo tiene centro en las coordenadas 37° norte, 98.5° oeste. En la Tabla 4.1 se presenta un resumen de las definiciones horizontales de cada uno de los dominios. Para la resolución vertical de los dominios en donde se realizaron las aplicaciones del MM5 se definieron 34 niveles de presión sigma. El último de los niveles está a una altura aproximada de 15 km. Los niveles empleados fueron los siguientes: 1.0000, 0.9975, 0.9950, 0.990, 0.980, 0.970, 0.960, 0.940, 0.920, 0.900, 0.875, 0.850, 0.820, 0.790, 0.755, 0.720, 0.685, 0.650, 0.615, 0.580, 0.545, 0.510, 0.475, 0.440, 0.400, 0.360, 0.320, 0.280, 0.240, 0.200, 0.160, 0.120, 0.080, 0.040. Los niveles en la vertical son los mismos para todos los dominios y fueron los mismos empleados en aplicaciones previas del MM5 al noreste y noroeste Mexicano (Vanoye y Mendoza, 2009).

Tabla 4.1 Configuración de los dominios de modelación

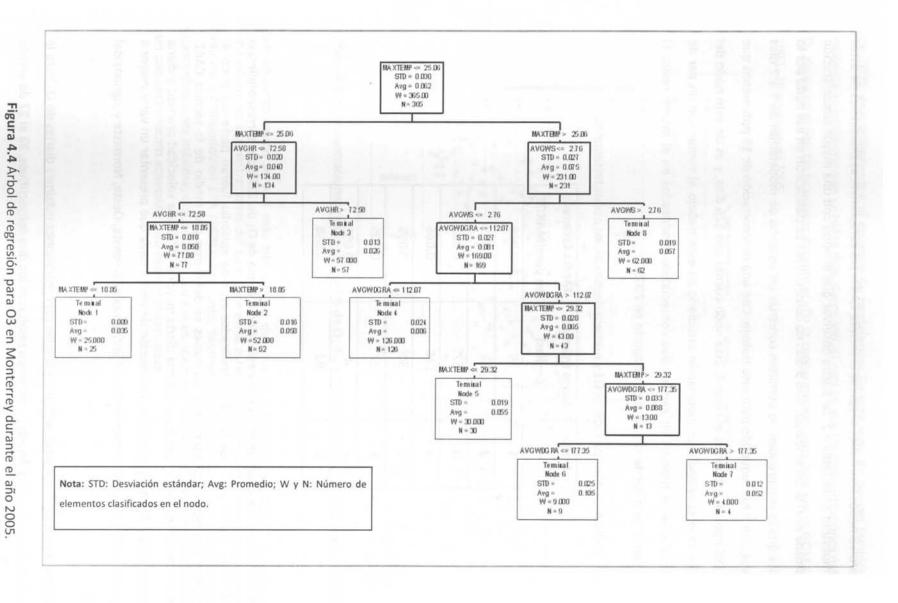
Dominio	Tamaño de celda (km)	Número de celdas (x)	Número de celdas (y)
D01	72	79	79
D02	24	118	169
D03	8	82	82

Para la aplicación del CMAQ se extrapolaron los campos meteorológicos obtenidos en la aplicación del MM5 a los niveles verticales utilizados por el CMAQ, empleando el Meteorology-Chemistry Interface Processor (MCIP) (Byun *et al.*, 1999). Los niveles verticales en presión sigma definidos para la aplicación del CMAQ fueron 13 y son los siguientes: 1.0000, 0.9975, 0.9950, 0.990, 0.980, 0.960, 0.920, 0.875, 0.820, 0.650, 0.475, 0.320 y 0.160. En metros sobre el nivel de la superficie, los niveles definidos fueron: 18, 36, 72, 145, 294, 597, 950, 1'399, 2'940, 4'849, 6'964, 9'896, 14'640. Para el manejo del transporte de especies químicas se requiere una menor resolución en los niveles superiores, donde los gradientes de concentración de contaminantes son menores. Por tanto, no es necesario tener el mismo número de niveles en la aplicación del CMAQ, que en la aplicación del MM5. Así mismo, los recursos computacionales necesarios para ejecutar el CMAQ con un alto número de capas verticales limitan el número de niveles que se especifican.

4.2 Selección del Episodio de Modelación

En la presente sección se muestran los resultados obtenidos al aplicar la metodología de árboles de clasificación y regresión (CART) para el AMM. Como se mencionó en la sección 3.1, se utilizaron los datos provenientes de la estación de monitoreo ambiental del SIMA ubicada en el municipio de Santa Catarina. El episodio seleccionado fue analizado, también, con dos series de tiempo que incluyen las concentraciones máximas diarias de O_3 del año 2005 en esa estación y en la ubicada en el centro del AMM.

Como se mencionó en la sección de metodología, las variables utilizadas para la selección del episodio fueron: como variable dependiente, concentración máxima diaria de O₃ (MAXOZ) y como variables independientes se consideraron la temperatura máxima diaria (MAXTEMP), temperatura promedio diaria (AVGTEMP), humedad relativa promedio diaria (AVGHR), velocidad del viento promedio diaria (AVGWS) y por último, la dirección del viento promedio diaria (AVGWDGRA). Cabe destacar que de las variables de decisión independientes seleccionadas, la única que no fue factor para realizar alguna división de datos fue AVGTEMP. El árbol de regresión resultante se muestra en la Figura 4.4.



Se obtuvieron 8 nodos terminales al aplicar la técnica CART. Las características principales de estos nodos se muestran en la Tabla 4.2. Se puede observar que el nodo con una mayor concentración media estimada es el 6. Sin embargo, sólo 9 días no consecutivos se clasificaron en ese nodo por lo cual los días que lo comprenden no permiten construir un episodio de modelación de 5 a 7 días consecutivos, como fue requerido para este trabajo. Con una concentración de 18 ppb menos que el nodo 6 (86 ppb) se encuentra el nodo 4. Este nodo cuenta con 126 días, y es de este nodo del cual se seleccionó el episodio de modelación estudiado en este trabajo al contar con un par de períodos en donde se tuvieron suficientes días consecutivos catalogados en el mismo nodo. El episodio seleccionado fue del día 22 al 27 de agosto de 2005.

Tabla 4.2 Concentración de O3 y número de días de los nodos terminales.

Nodo	Casos (número	Media Estimada
	de días)	en ppm(MAXOZ)
1	25	0.035
2	52	0.058
3	57	0.026
4	126	0.086
5	30	0.055
6	9	0.105
7	4	0.052
8	62	0.058

El episodio seleccionado presentó una concentración máxima de O₃ de 111 ppb, correspondiendo al día 24 de agosto. Para que los días clasificados en este episodio fueran parte del nodo 4, cumplieron con ciertas características, las cuales se definieron por medio de la técnica CART. Debieron presentar una temperatura máxima diaria mayor a 25°C, una velocidad promedio diaria menor o igual a 2.76 m/s y por último la dirección de viento tenía que presentar un valor mayor a 112 grados, es decir vientos provenientes del Sur, Sureste, Suroeste, Oeste, Noroeste y algunos del norte.

La Figura 4.5 presenta una serie de tiempo con las concentraciones máximas diarias de O₃ para la estación de Santa Catarina. En ella se observan resaltados los días consecutivos, 22 al 27 de agosto

de 2005, que comprenden el episodio de modelación. En esta serie de tiempo también se hace evidente el problema que ya había sido planteado, el cual es que las concentraciones máximas de O₃ violan en repetidas ocasiones durante el año la concentración permitida por la NOM-020-SSA1-1993, 28 veces en el 2005.

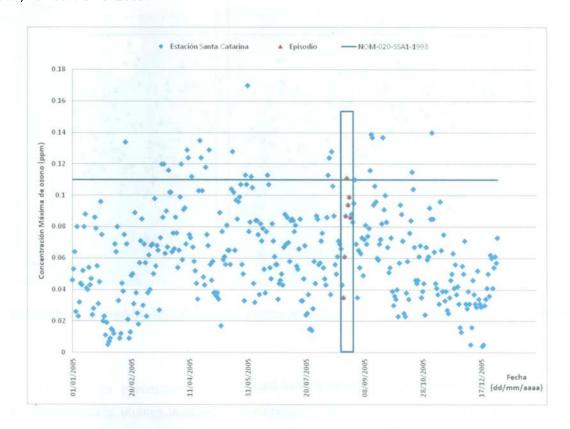


Figura 4.5 Concentraciones máximas diarias de O₃ durante el 2005 en la estación Santa Catarina.

Sin embargo, como se verá más adelante, el desempeño estadístico del modelo químico para reproducir las concentraciones del caso base en la estación de Santa Catarina no satisficieron los valores establecidos en EPA (1991). Por tanto, también se presenta la serie de tiempo con las concentraciones máximas diarias de O₃ para la estacion del Obispado (Figura 4.6), la cual mostro un comportamiento aceptable para replicar el caso base.

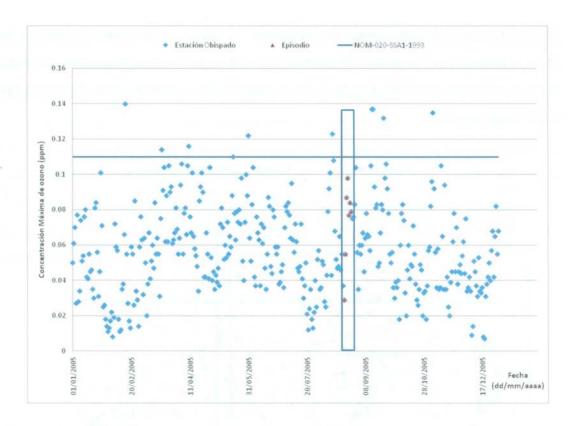


Figura 4.6 Concentraciones máximas diarias de ozono durante el 2005 en la estación Obispado.

4.3 Evaluación estadística para replicar el caso base

A continuación se muestran los resultados estadísticos obtenidos al evaluar el desempeño de los modelos, meteorológico y químico, para reproducir el caso base. Un buen desempeño permite que los resultados presentados para los casos de control de emisiones estén validados por un sistema de modelación que reproduce adecuadamente la realidad actual de la atmósfera.

4.3.1 Evaluación estadística del desempeño del modelo Meteorológico

Se comienza por mostrar la evaluación estadística aplicada al modelo meteorológico MM5. Como se planteo en el capítulo 3, se compararon los resultados obtenidos contra los valores guía propuestos por Emery *et al.* (2001).

Para la evaluación del modelo meteorológico se tomaron en cuenta observaciones horarias de la base de datos *TDL U.S. and Canada Surface Hourly Observations*, la cual tiene alrededor de 1000 estaciones de monitoreo en Estados Unidos de América y Canada, así como estaciones en gran parte de Centro América y en México, estas últimas siendo de gran interes para esta investigación. En el dominio evaluado en esta sección (D03), se contó con datos de 49 estaciones de monitoreo,

de las cuales 7 se encuentran en territorio mexicano, y de estas 2 se encuentran en el AMM, especificamente en los aeropuertos Mariano Escobedo y del Norte. En la Figura 4.7 se muestra la ubicación de las estaciones evaluadas.

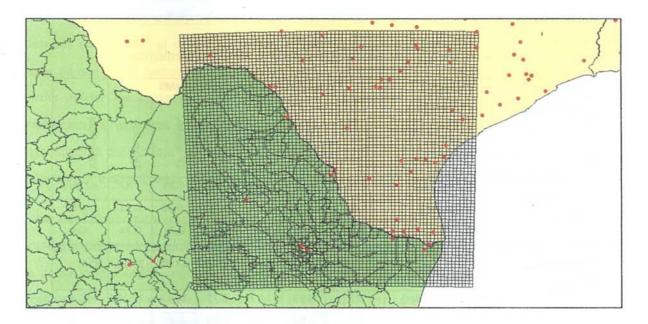


Figura 4.7 Estaciones de monitoreo ambiental ubicadas en el domino 3.

Un resumen de las parámetros estadísticos de interes se presenta en la Tabla 4.3. De los resultados estadísticos se puede resaltar que la variable que se reprodujo en mejor medida por el modelo es la velocidad del viento, ya que cumple con los valores recomendados para todos los días del episodio. La variable de velocidad de viento es de relevancia para el estudio, ya que esta determina el grado en que se renueva la atmosféra del AMM con aire "fresco" y la velocidad a la cual se transportan los contaminanes fuera del área de interés.

En la Tabla 4.3 también se resaltan los valores que incumplen las guías planteadas. El caso más interesante es el de la dirección del viento, ya que en ninguno de los días está dentro de los valores establecidos de evaluación. Sin embargo, en 6 días el error es menor a 30° y solamente el día 27 de agosto presente un error relativamente significativo. La temperatura excede en 3 días (23, 26 y 27 de agosto) los valores propuestos para el sesgo, sin embargo cumple en todos los días del episodio con los límites para el error neto e índice de ajuste (el cual siempre es relativamente alto, >0.93). La temperatura es una variable de interés ya que no solamente influye en la evolución de los campos de viento, también impacta en las velocidades de reacción química entre

contaminantes y en las tasas de emisión de ciertos contaminantes (biogénicos y antropogénicos). En cuanto a la humedad, se presenta un día en el cual el modelo falla en los tres estadísticos evaluados, el día 25 de agosto. Los demas días del episodio se tiene un buen desempeño en lo que a esta variable respecta.

Tabla 4.3 Parámetros estadísticos para el modelo meteorológico.

Parámetro	Parámetro	ν	alor obte	ni đo po r	el model	o MM5		
Meteorológico	estadístico	23 agosto	24 agosto	25 agosto	26 agosto	27 agosto	Episodio	Valor Guía
	RCECM (m/s)	1.36	1.74	1.49	1.26	1.25	1.42	≤2 m/s
Velocidad de vîento	Sesgo (m/s)	0.41	0.78	0.51	0.22	-0.36	0.31	N/A
	1A	0.77	0.72	0.7	0.76	0.72	0.74	≥0.6
Dirección de	Error neto (Grados)	25.61	20.17	27.11	30.08	47.61	30.12	≤20°
viento	Sesgo (Grados)	11	9.99	14.7	8.75	16.32	12.15	N/A
	Error neto (K)	1.6	1.53	1.46	1.47	1.87	1.59	≤2 K
Temperatura	Sesgo (K)	1.06	0.41	0.43	0.86	1.05	0.76	≤±0.5 K
	IA	0.94	0.94	0.94	0.95	0.93	0.94	≥0.7
Humedad	Error neto (g/kg)	1.82	1.76	2.26	1.61	1.56	1.8	≤2 g/kg
	Sesgo (g/kg)	-1.17	-0.36	-1.77	-1.16	-0.37	-0.97	±1 g/kg
	10A	0.78	0.74	0.67	0.81	0.78	0.76	≥0.7

No es objetivo de esta tesis el análisis detallado de la meteorológia presente en el episodio de modelación. Sin embargo, como los campos meteorológicos obtenidos en el MM5 son utilizados para posteriores aplicaciones en este trabajo, es importante tener presente el desempeño estadístico mostrado, ya que este afecta los resultados obtenidos en modelo químico, los cuales se analizan en la siguiente sección.

Para cerrar esta seccion es importante resaltar que los resultados obtenidos son aceptables para ser utilizados en el modelo fotoquímico, ya que, en general, el cumplimiento de los parámetros analizados señalan que se cumple con los lineamientos previamente establecidos. En lo que respecta a la dirección del viento, que es la que nos indica cual será el destino de los contaminantes, en este caso nos permite observar que no habrá un cambio radical de dirección en

el transporte de los contaminantes emitidos, y las fuentes que impactan un determinado punto no habrán de cambiar de forma drástica con los valores presentados.

4.3.2 Evaluación estadística del desempeño del CMAQ

Después de modelar el caso base con el CMAQ, es necesario evaluarlo estadísticamente para saber en qué grado fueron reproducidas las concentraciones reales dadas en el episodio y de esta forma validar los escenarios planteados más adelante. No se tomaron en cuenta para esta evaluación los primeros 2 días del episodio, ya que estos se consideran como el período de estabilización del modelo químico. Asimismo, se descartaron los pares de datos que mostraran un valor menor a 40 ppb en la concentración de O₃, tal como se recomienda en USEPA (2008).

Cabe también comentar que no se incluyeron en el análisis posterior los datos de la celda correspondiente a la estación de Santa Catarina, ya que por la topografía del lugar y el tamaño de la celda que intenta reproducir la concentración de ese punto, presentó un desempeño desfavorable. Se espera que una malla más fina a la utilizada en este proyecto (celdas de 8 km x 8 km) arroje mejores resultados para las concentraciones de esta estación.

Finalmente, los criterios seleccionados para evaluar la DNP y el ENP fueron ±13% y 20%, respectivamente. Dichos valores fueron obtenidos de los resultados estadísticos obtenidos en diversas aplicaciones del modelo CMAQ a diferentes regiones de los EE.UU. (Tabla 4.4).

Tabla 4.4 Resumen del desempeño estadístico para la predicción del O₃ horario en la aplicación del CMAQ 2002 (USEPA, 2008)

CMAQ	2002 Ozono Horario:								ļ
Çı	ut of de 40 ppb	Observaciones	DNP	ENP			Observaciones	DNP	ENP
	12-km EUS	241185	-0.7	15.9		12-km EUS	235090	-8.7	17.8
	12-km WUS	124931	-3.7	15.9		12-km WUS	125575	-7.9	20.1
Мауо	Northeast	51055	-1.2	17.1	gosto	Northeast	53837	-6.4	16.7
	Midwest	55859	3.3	16.2		Midwest	54179	-10.8	19.1
	Southeast	69073	-2.5	14.1		Southeast	62506	-9.4	17.3
	Central	41728	-6.4	17.3		Central	41456	-9.3	18.7
	West	111385	-3.9	16.1		West	110225	-8.5	20.6
	12-km EUS	256263	-7.5	16.8		12-km EUS	179156	-9.9	17.2
	12-km WUS	125662	-8.4	17.7	ļ <u> </u>	12-km WUS	99710	-10.7	19.0
	Northeast	61354	-8.5	17.3		Northeast	44678	-8.7	16.3
Junio	Midwest	54515	-7.2	17.9	Septiembre	Midwest	34285	-11.4	18.5
_	Southeast	67867	-7.2	15.3	Sept	Southeast	41627	-8.2	16.5
	Central	46026	-10.0	17.5		Central	41549	-12.8	18.8
	West	109157	-8.8	18.2		West	83921	-11.7	20.0
	12-km EUS	257076	-5.3	17.7		12-km EUS	1168770	-6.4	17.1
	12-km WUS	116785	-12.0	21.5	oral	12-km WUS	592663	-8.4	18.8
	Northeast	66774	-3.9	17.0	Temporal	Northeast	277698	-5.4	16.9
Julio	Midwest	59360	-10.5	19.4		Midwest	258198	-7.3	18.3
	Southeast	68619	-3.6	16.5		Promedio	144363	-7.4	17.8
	Central	36021	-3.6	18.7	Resumen	Mínimo	34285	-13.6	14.1
	West	104321	-13.6	21.8		Máximo	1168770	3.3	21.8

Los parámetros estadísticos obtenidos al comparar la simulación del caso base contra las concentraciones de las diferentes estaciones de monitoreo del AMM se listan en la Tabla 4.5. Se presentan los resultados por día para las 4 estaciones de monitoreo y por estación de monitoreo para todos los días, así como un condensado que engloba los resultados para las 4 estaciones durante todo el episodio de modelación.

Tabla 4.5 Parámetros estadísticos del desempeño de CMAQ para O₃.

Ozono	24 de agosto	25 de agosto	26 de agosto	27 de agosto	Obispado	San Nicolás	San Bernabé	La Pastora	Promedio	Guía
EPP	-36	-20	-4	14	-8	41	12	10	-8	±20%
DPN	3	14	13	24	-0.3	33	11	13	14	±15%
EBNP	21	23	16	27	15	33	17	23	21	35%
DNP	-3	9	11	23	-3	32	9	11	11	±13%
ENP	22	21	15	26	15	32	16	22	20	20%
Obs.	17	13	29	23	20	20	25	17	82	

De la Tabla 4.5, se puede observar que el día que fue replicado por el modelo con mayor apego a la realidad es el 26 de agosto, ya que todos los parámetros estadísticos están dentro de los rangos que marcan las guías. El día 25 de agosto también fue un día aceptable al solamente rebasar ligeramente la guía para valores del ENP (20% vs. 21%). En cuanto a las estaciones de monitoreo ambiental, cabe resaltar que la que menor concordancia tuvo con el modelo fue la de San Nicolás, ya que el modelo sólo alcanza un valor aceptable para la EBNP, fallando en los demás parámetros. Todas las demás estaciones tuvieron un desempeño aceptable, solamente rebasando en la estación La Pastora el valor guía para en ENP.

Se puede resaltar de la Tabla 4.5, que los primeros tres días de la simulación, hubo una subestimación del pico máximo de O₃, lo cual se deduce del valor alcanzado en esos días para el EPP. Sin embargo para las concentraciones promedio, el comportamiento fue opuesto, ya que el valor del DPN indica una sobre estimación de las concentraciones de O₃ simuladas para los primeros tres días evaluados.

El desempeño mostrado por el modelo para los distintos días del episodio permitió decidir cuáles serían los días para los cuales se fabricaron tanto las isopletas de O₃ como los mapas comparativos de diferencia entre el caso base y los escenarios de reducción. Los días seleccionados fueron el 25 y 26 de agosto. En general, el desempeño mostrado por el modelo estuvo acorde a los parámetros estadísticos establecidos para su evaluación. El modelo también reprodujo, como se verá más adelante, la variación temporal de las concentraciones de O₃ conforme a lo esperado. Las concentraciones fueron mayores alrededor del medio día, momento cuando las temperaturas son mayores y la radiación solar acelera la formación fotoquímica de O₃ al procesar las emisiones de

sus precursores que ocurrieron durante las horas de la mañana. Así mismo, durante la noche, ya sin la presencia de radiación solar, se espera un decremento en la concentración de O_3 , tal como sucedió en el episodio modelado, por lo cual el modelo también está reproduciendo la variación temporal esperada en el O_3 y por tanto es posible confiar en los resultados presentados en este trabajo.

En las siguientes figuras se muestran las series de tiempo que comparan las concentraciones medidas por las estaciones de monitoreo del AMM y las proporcionadas por el modelo CMAQ. En la Figura 4.8 se presenta el gráfico correspondiente a la estación Obispado, en la cual se puede notar una tendencia a subestimar el valor del pico de concentración máximo de O₃ durante los primeros tres días evaluados. Así mismo se observa una mejor tendencia en reproducir el episodio en los últimos dos días (26 y 27 de agosto).

En la Figura 4.9, que muestra los resultados para la estación ubicada en San Nicolás, se puede observar una tendencia generalizada del modelo a sobreestimar las concentraciones de O_3 , principalmente a la hora que se presenta el máximo, el cual es de principal interés en este trabajo. Cabe destacar que es en esta estación donde se presentó el peor desempeño estadístico.

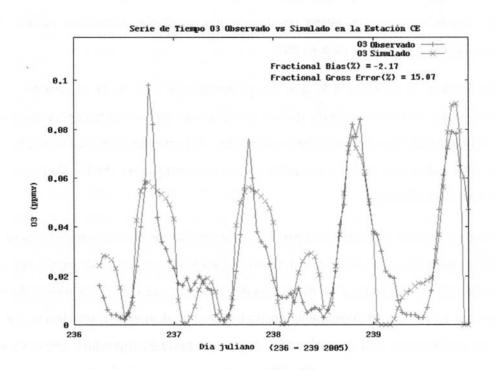


Figura 4.8 Serie de tiempo de la concentración de O_3 simulada (azul x) vs observada (roja +) en la estación Obispado.

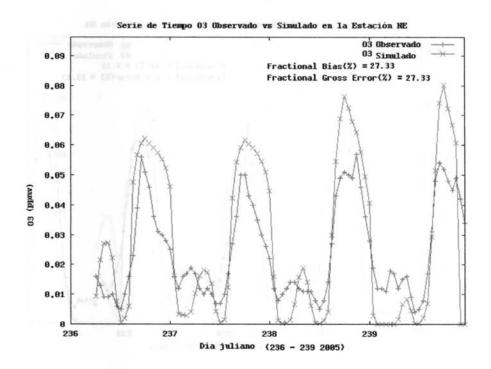


Figura 4.9 Serie de tiempo de la concentración de O₃ simulada (azul x) vs observada (roja +) en la estación San Nicolás.

Continuando con el análisis de las series de tiempo, en la Figura 4.10 se presenta los datos graficados para la estación de San Bernabé, ubicada al noroeste del AMM, en dicha figura no se observa una tendencia generalizada a sub o sobre estimar las concentraciones del contamínate de interés (O₃), lo cual se puede corroborar con los datos de la Tabla 4.5, donde se muestra que la estación NO presenta valores acorde a las guías. Sin embargo, durante las noches las concentraciones simuladas presentan una subestimación en todos los días, esto podría deberse a una alta concentración estimada de NO en la región correspondiente a la estación San Bernabé.

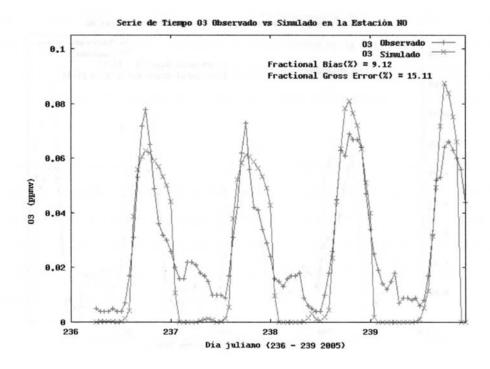


Figura 4.10 Serie de tiempo de la concentración de O₃ simulada (azul x) vs observada (roja +) en la estación San Bernabé.

En la Figura 4.11 se observa la serie de tiempo correspondiente a la estación de monitoreo ubicada en La Pastora. En este caso, no se contó con información de concentraciones observadas para el día 25 de agosto. Sin embargo esta falta de datos no repercutió en el desempeño mostrado por el modelo en esa estación, ya que cumplió con el desempeño en 4 de los 5 parámetros utilizados fallando únicamente en el ENP. En el mismo gráfico (Figura 4.11), es posible observar una subestimación en las concentraciones de O₃ correspondientes al día 24, una sobreestimación en las correspondientes al día 27 y un desempeño adecuado para el día 26, lo que permitió que este día tuviera el mejor desempeño general.

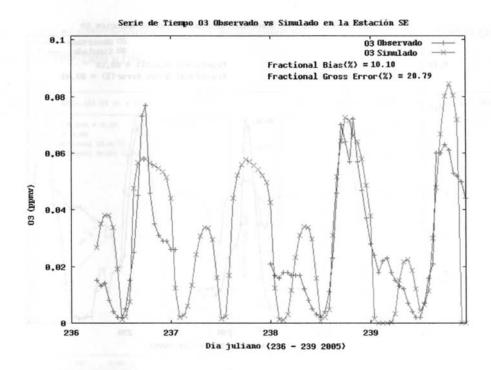


Figura 4.11 Serie de tiempo de la concentración de O_3 simulada (azul x) vs observada (roja +) en la estación La Pastora.

La última de las series de tiempo de este bloque es la correspondiente a Santa Catarina (Figura 4.12). En ella se puede observar una tendencia a sobreestimar las concentraciones bajas en los cuatro días evaluados, así como una subestimación de los picos de concentración máxima. Aún más, la tendencia general de respuesta del modelo (concentración de O₃) no representa un comportamiento natural como el que se aprecia en las series de tiempo de las otras estaciones: ciclos diurnos y nocturnos bien establecidos. En general para esta estación no se tuvo un buen desempeño, los niveles de O₃ no representan una respuesta natural esperada, y como se había mencionado anteriormente, no se consideró para la evaluación general de desempeño del modelo. Esta estación de monitoreo se encuentra al oeste del municipio de Santa Catarina, región que cuenta con una topografía compleja, ya que está en medio de un cañón, lo cual dificulta su modelación con una malla con las celdas utilizadas en este trabajo (8 km x 8 km en la horizontal). Es posible que una mayor definición horizontal mejore los resultados obtenidos para esta estación en particular, como ya se había mencionado.

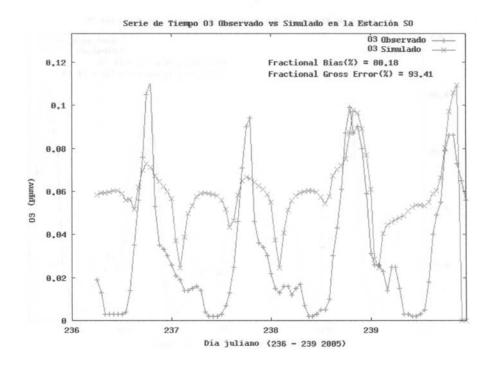


Figura 4.12 Serie de tiempo de la concentración de O₃ simulada (azul x) vs observada (roja +) en la estación Santa Catarina.

En la Figura 4.13 se presentan las gráficas de dispersión que representan las concentraciones estimadas por el modelo, en el eje vertical, y las concentraciones medidas en cuatro estaciones de monitoreo del AMM, en el eje horizontal. Se puede observar que en los primeros dos días (Figura 4.13 a y b) el modelo presentó una tendencia a no tener un buen desempeño, lo que se corrobora con la información de la Tabla 4.5, en la cual se resalta que los días 24 y 25 de agosto presentan los valores más grandes para el EPP. En esos días la modelación reporta valores del pico máximo que no cumplen con el valor guía.

El mejor desempeño se presenta el día 26 de agosto en la Figura 4.13 c. En esta gráfica se observa una tendencia de los datos a agruparse sobre la línea de 45°. Esto corrobora lo que ya había sido resaltado en la Tabla 4.5, donde se indica que el mejor desempeño se obtuvo para el día 26 de agosto.

En la Figura 4.13 d (27 de agosto), se puede observar una tendencia general de sobreestimar la concentración de O_3 con respecto a las mediciones de las estaciones de calidad del aire. Aun así se

logra alcanzar valores satisfactorios para tres de los cinco parámetros evaluados estadísticamente, los cuales fueron: EPP, DPN y DNP.

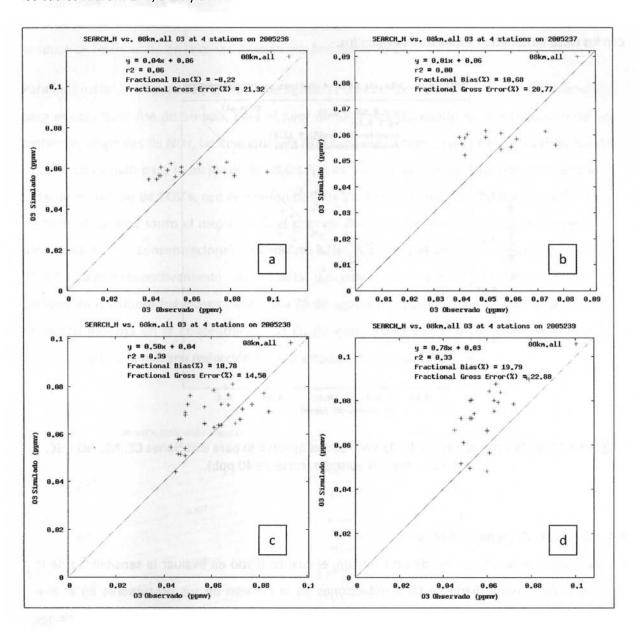


Figura 4.13 Gráfica de dispersión de O3 simulado vs observado para estaciones CE, NE, NO y SE, para los días 24 (a), 25 (b), 26 (c), y 27 (d) de agosto de 2005.

La información de todas las concentraciones estimadas por el modelo y las medidas en las cuatro estaciones de monitoreo evaluadas se condensa en la Figura 4.14. En ella se puede observar que existe una tendencia general a sobreestimar las concentraciones reportadas por las estaciones de monitoreo (DPN positiva). También se observa una subestimación general en los picos máximos

(EPP negativa). Esta dificultad en la estimación del pico de O_3 se puede atribuir al tamaño de la celda (8 km x 8 km), la cual artificialmente puede estar diluyendo las concentraciones de precursores. De manera global, el modelo presentó un comportamiento adecuado, ya que cumplió con los cinco parámetros estadísticos evaluados.

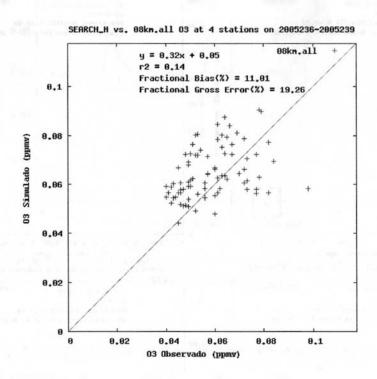


Figura 4.14 Gráfica de dispersión de O3 simulado vs observado para estaciones CE, NE, NO y SE, durante todo el episodio (corte de 40 ppb).

4.4 Isopletas de O₃ para el AMM

En línea con el objetivo general de este trabajo, el cual consistió en evaluar la sensibilidad de la concentración máxima diaria de O_3 a reducciones en la emisión de sus precursores en el aire ambiente del AMM, se presentan las Isopletas de O_3 , que fueron generadas para cuatro estaciones de monitoreo presentes en área de interés en el año 2005.

De acuerdo con la evaluación estadística del desempeño del modelo CMAQ, se seleccionaron dos días para construir las gráficas de nivel de concentración de O₃. Los días seleccionados fueron el 25 y 26 de agosto de 2005, ya que son los que presentaron un mejor desempeño en la modelación de la concentración de O₃ para el caso base.

En la Figura 4.15 se presentan las isopletas correspondientes a la estación de monitoreo Obispado, se observa que las reducciones propuestas de COV's provocan una reducción en la concentración máxima diaria de O_3 . Sin embargo, los casos propuestos de reducción en la emisión de NOx produce un incremento en la concentración máxima diaria de O_3 .

Para esta estación (Obispado), el día 25 de agosto la concentración máxima diaria de O₃ simulada para el caso base fue de 56 ppb, para el peor de los casos (Escenario 9, 50% reduccion de las emisiones originales de NOx, las emisiones de COV's iguales al caso base), la concentración fue de 61 ppb. En cambio para el mejor de los casos fue de 55 ppb, la cual corresponde al escenario 5 (50% de reduccion de COV's, con la emision de NOx sin modificación respecto al caso base). Para el día 26 de agosto tanto el mejor como el peor de los casos fueron los mismos escenarios que para el día 25. Las concentraciones para el caso base, el mejor y el peor de los escenarios fueron 77, 67 y 95 ppb respectivamente. Cabe resaltar que para esta estación la sensibilidad del O₃ a los cambios en emisiones fue mayor para el día 26 de agosto que para el día 25. El día 26 se dió una reducción máxima en la concentración de O₃ de hasta 10 ppb con respecto al caso base; en cambio, el día 25 la máxima reducción en esta estación fue marginal (1 ppb).

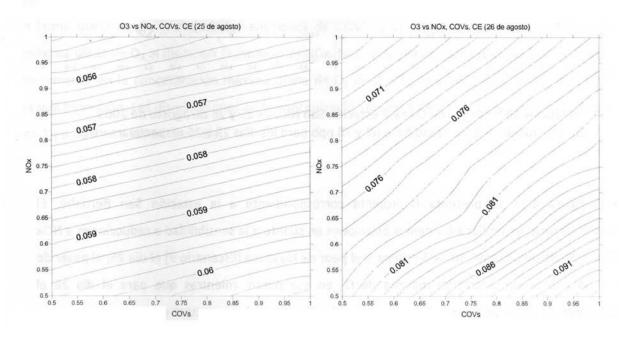


Figura 4.15 Isopletas de O_3 para estación Obispado 25 y 26 de agosto de 2005. Concentración de O_3 en caso base 56 y 77 ppb para los dias 25 y 26 respectivamente.

Las isopletas de O₃ para la estación de San Nicolás se presentan en la Figura 4.16, en esta estación se presenta el mismo caso que para la ubicada en el centro del AMM (estación Obispado): a reducción en las emisiones NOx la concentración máxima de O₃ en la estación aumenta y a reducciones en las emisiones de COV´s, disminuye. Para el día 25 la máxima reducción de la concentración máxima diaria de O₃ fue de 2 ppb, y para el día 26 fue de 6 ppb, en ambos casos correspondiendo al escenario 5 (50% de reducción en las emisiones de COV´s, manteniendo las emisiones de NOx como en el caso base).

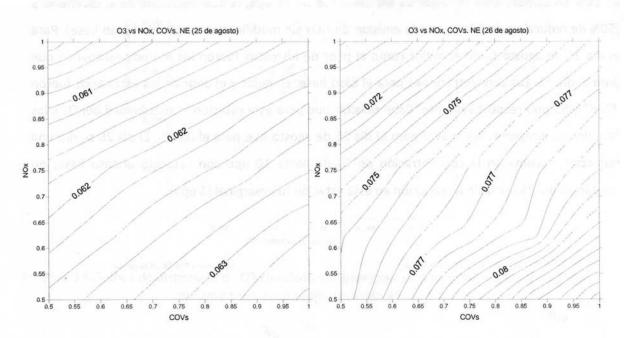


Figura 4.16 Isopletas de O_3 para estación San Nicolás 25 y 26 de agosto de 2005. Concentración de O_3 en caso base 62 y 76 ppb para los dias 25 y 26 respectivamente.

En la Figura 4.17 se presenta la isopleta correspondiente a la estación San Bernabé. El comportamiento es similar a las demás estaciones en cuanto a la sensibilidad a reducciones a NOx y COV's. Se da un incremento de 3 ppb para el peor de los casos (Escenario 9) el día 25, al pasar de 61 a 64 ppb la concentración máxima de O₃ en ese punto, mientras que para el día 26 el incremento es de 14 ppb para el mismo escenario. En el caso base se tuvo una concentración de 81 ppb y para el peor de los escenarios una concentración de 95 ppb. En cuanto a las reducciones logradas, en el escenario 5, se obtienen los mejores resultados al lograrse disminuir la concentración máxima diaria de O₃ en 2 y 8 ppb los días 25 y 26 de agosto, respectivamente.

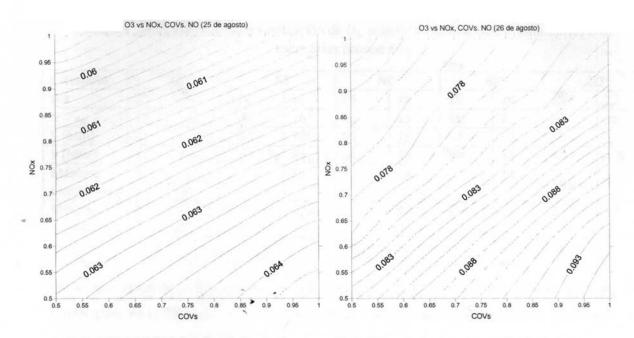


Figura 4.17 Isopletas de O_3 para estación San Bernabé 25 y 26 de agosto de 2005. Concentración de O_3 en caso base 61 y 81 ppb para los dias 25 y 26 respectivamente.

Por último, las isopletas correspondientes a la estación La Pastora se encuentran en la Figura 4.18. Al igual que las tres estaciones anteriores, se presenta una disminución en la concentración máxima diaria de O_3 al reducir las emisiones de COV's y un incremento en la concentración máxima diaria de O_3 al disminuir la emisión de NOx. En el peor de los casos (Escenario 9) se dió un incremento en la concentración máxima diaria de O_3 de 2 y 11 ppb los días 25 y 26 de agosto, respectivamente. Las disminuciones en la concentración máxima de O_3 para el escenario 5 fueron de 1 y 6 ppb para los mismos días.

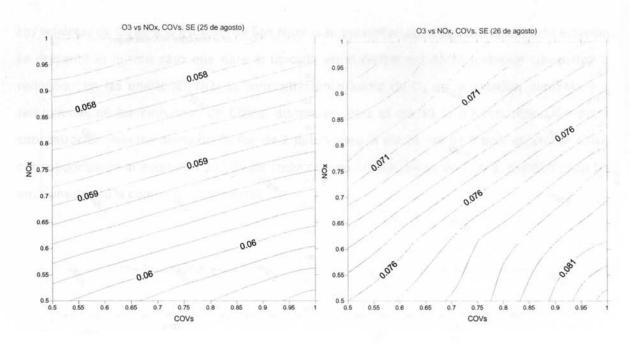


Figura 4.18 Isopletas de O_3 para estación La Pastora 25 y 26 de agosto de 2005. Concentración de O_3 en caso base 58 y 72 ppb para los dias 25 y 26 respectivamente.

Si bien, las isopletas de O_3 describen el comportamiento de la concentración de este contaminante en cada una de las estaciones analizadas del AMM, es relevante analizar también cuales fueron los máximos efectos logrados ante los escenarios propuestos, ya sean estos positivos o negativos a los fines de las estrategias de control propuestas.

En la Tabla 4.6 se presentan las concentraciones máximas para cinco estaciones de monitoreo del AMM, tanto para el caso base como para el peor y mejor escenarios, 9 y 5 respectivamente. La información mostrada en la Tabla 4.6 permite además, resaltar las diferencias en sensibilidad entre diferentes días de un mismo episodio de modelación. En general, se presenta una mayor sensibilidad de la concentración de O₃ a cambios en la emisión de NOx. Por ejemplo, el día 26, en la estación Obispado, el máximo incremento es de 18 ppb. En cambio, la máxima reducción es de sólo 10 ppb. Para el mismo día, pero en la estación San Bernabé, los máximos incrementos y reducciones son de 14 y 8 ppb respectivamente. Los incrementos en la concentración de O₃ se debieron, en ambas estaciones, a reducciones en la emisión de NOx y las disminuciones a decrementos en la emisión de COV's.

Tabla 4.6 Sensibilidad de la concentración de O₃, máximos incrementos y reducciones ante escenarios propuestos.

Escenario		CE		NE	1	NO	1	SE		so
Día	25	26	25	26	25	26	25	26	25	26
1	56	77	62	76	61	81	58	72	67	98
5 (Mín)	55	67	60	70	59	73	57	67	65	84
9 (Máx)	61	96	63	84	65	95	60	83	70	107
Máximo incremento	5	18	2	8	3	14	3	11	3	9
Máxima reducción	1	10	2	6	2	8	1	6	2	14

En lo que respecta a las diferencias entre días distintos dentro de un mismo episodio de modelación, en la Tabla 4.6 es posible notar el cambio que se presentó entre el día 25 y 26 de agosto, por ejemplo, en la estación Obispado, la máxima reducción en la concentración máxima diaria de O₃ para los días 25 y 26 de agosto fue de 1 y 10 ppb para el mismo escenario. En cuanto a los incrementos, para los días 25 y 26 fueron de 5 y 18 ppb para la estación Obispado considerando en ambos casos el escenario 9. En general, la sensibilidad de la concentración máxima diaria de O₃ fue mayor el día 26 que el 25 de agosto del 2005.

En cuanto a la diferencia en la sensibilidad en la concentración máxima de O₃ en el AMM, sería de interés conocer las razones de esta diferencia. Una posibilidad podría ser una atmósfera envejecida conforme se desarrolla el episodio de alta contaminación por O₃. Es decir que existen en la atmósfera mayor cantidad de compuestos producto de la oxidación de los precursores de O₃. Esto se podría averiguarse en trabajos posteriores.

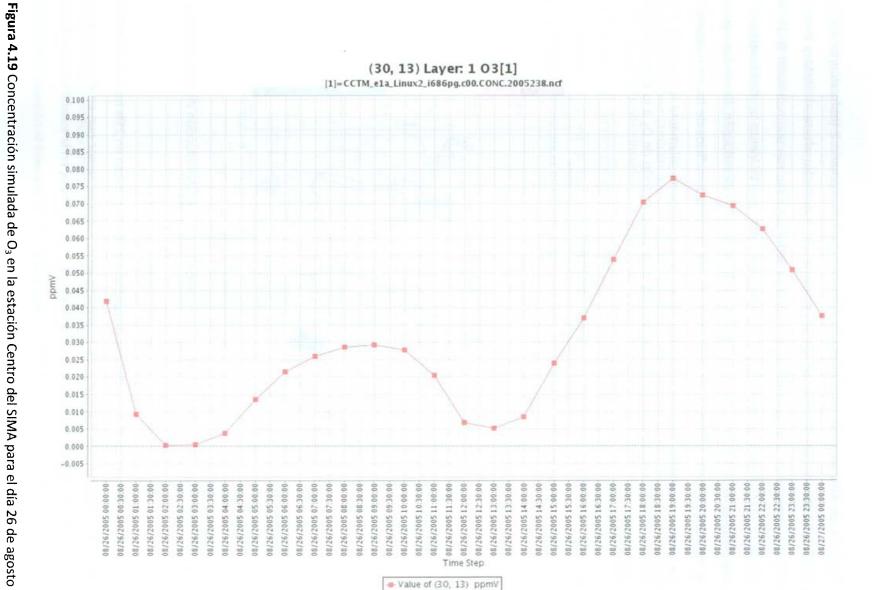
En cuanto a la sensibilidad espacial, al analizar tanto la ubicación de las estaciones como los cambios provocados en las concentraciones máximas de O₃ al aplicar las reducciones en emisiones de NOx y COV's, es posible observar que existe un mayor impacto en las estaciones de San Bernabé y Obispado, que se encuentran viento abajo de las estaciones La Pastora y San Nicolás, las cuales presentan una sensibilidad menor a los cambios de emisiones. Por ejemplo, para el día 26 de agosto las máximas reducciones en la concentración máxima de O₃ en las estaciones viento abajo (San Bernabé y Obispado) son de 8 y 10 ppb respectivamente, tanto que en las estaciones viento arriba (San Nicolás y La pastora) las máximas reducciones en el pico máximo de O₃ son de 6 ppb para ambas estaciones. Esté efecto podría a deberse a la dispersión de los contaminantes dados los vientos predominantes en el AMM, ya que en una estación viento abajo de otra de

referencia, será impactada por las estrategias de reducción aplicadas a mas fuentes. Es decir, una mayor cantidad de contaminantes será reducida en una estación viento abajo que en una viento arriba debido a la dispersión provocada por los vientos predominantes en la región.

4.5 Mapas comparativos de diferencia entre el caso base y los escenarios de reducción

Al igual que para las construcción de las isopletas de O_3 , se utilizó el día 26 de agosto del 2005 para generar los mapas de diferencias de concentración entre el caso base y los escenarios de reducción evaluados. Para este fin, primero se seleccionó la celda correspondiente a la estación obispado del SIMA para definir la hora a la que se simuló la máxima concentración de O_3 .

En la Figura 4.19 se muestra la serie de tiempo de la concentración de O₃ para dicha estación y día. Se puede observar en la Figura 4.19 que la máxima concentración de O₃ en la estación centro se da a las 19:00 horas UTC. Así, los mapas de diferencias de concentración se muestran para esa hora en específico para todo el dominio de modelación con el fin de homologar los resultados. En todos los casos se graficó la diferencia en O₃ entre el escenario de control menos el O₃ del caso base, de tal manera que un valor positivo indica un aumento respecto al caso base y un valor negativo una disminución respecto al caso base.



de 2005.

En la Figura 4.20, se presenta el mapa de diferencia para el escenario 2 (reducción de 25% de COV's). Se observa que los efectos de la estrategia de control sólo afecta el AMM y tiene su máximo impacto en la zona oeste del municipio de Santa Catarina, con una reducción de 10 ppb (Ceda 27,14). Tal como se esperaba, el impacto de los patrones de viento predominantes en la región determinan las zonas de mayor impacto de las estrategias de reducción, siendo las regiones viento abajo las que obtienen, en este escenario, los mayores beneficios de las reducciones en emisiones propuestas. Para los escenarios donde se especificaron solamente reducciones en la emisión de COV's no se reportaron incrementos en la concentración de O₃ a lo largo de todo el dominio.

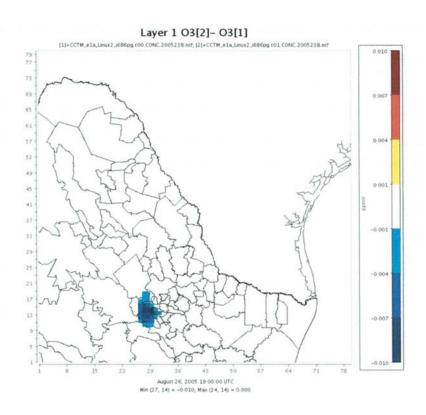


Figura 4.20 Mapa de la diferencia de concentración de O₃: caso de reducción de 25% de COV's.

En la Figura 4.21 se muestra el escenario de control cuando se reducen en 25% las emisiones tanto de COV's como de NOx (Escenario 3). El impacto en el AMM es menor que en el caso anterior, incluso se dan incrementos en la concentración de O_3 . Por ejemplo, en la estación Obispado para el caso base se tiene un máximo de 77 ppb, mientras que para este caso la concentración máxima de O_3 es de 79 ppb.

Sin embargo, es interesante observar que esta propuesta de control tiene mayor impacto espacial, que el escenario anterior, viento abajo de las fuentes de emisión (AMM, Monclova y Piedras Negras). Como se observa en las siguientes figuras (Figura 4.21, Figura 4.22, Figura 4.24, Figura 4.25, Figura 4.26 y Figura 4.27), en las cuales se tienen casos con reducciones de NOx, el impacto de los campos de viento es de gran relevancia en las regiones viento abajo de las principales fuentes de emisión de contaminantes.

Se puede observar también que las regiones urbanas presentan una atmósfera preferentemente inhibida por NOx (disminución en la emisión de NOx provoca una mayor concentración de O₃), en cambia las zonas rurales presentan atmósferas limitadas por NOx (disminución en la emisión de NOx provoca una menor concentración de O₃). Estos resultados concuerdan con aquellos presentados en Mendoza *et al.* (2000), Simpson (1995), Roselle *et al.* (1991), Sillman *et al.* (1990).

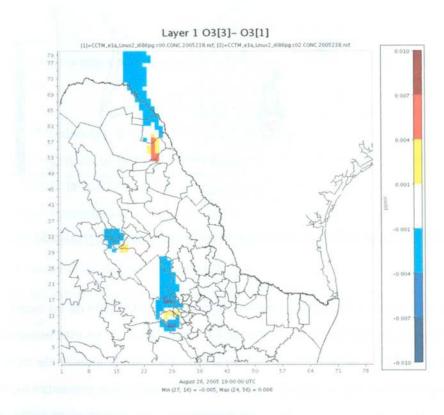


Figura 4.21 Mapa de la diferencia de concentración de O_3 : caso de reducción de 25% de COV's. y 25% de NOx.

Un escenario en el cual se propone una reducción de 25% de NOx, dejando las emisiones de COV's sin cambio con respecto al caso base (Escenario 4), se presenta en la Figura 4.22. El impacto viento abajo de las fuentes de emisión es muy similar al escenario de reducción de 25% de ambos precursores, sin embargo en lo que respecta al AMM existe un impacto perjudicial con respecto a la concentración de O₃, ya que se da un incremento de hasta 14 ppb en la estación de monitoreo de Santa Catarina (Celda 28, 13).

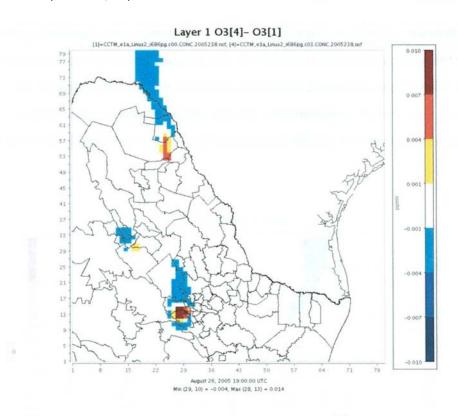


Figura 4.22 Mapa de la diferencia de concentración de O₃: caso de reducción de 25% de NOx.

El escenario que mejores resultados presentó durante la construcción de las isopletas, respecto a las reducciones en los niveles de O₃, se muestra en la Figura 4.23. En esta estrategia se propone una reducción de COV's de 50%, manteniendo sin modificación la emisión de NOx (Escenario 5). Una observación importante es que en ninguna parte del dominio se presentan incrementos en la concentración de O₃, y existe una reducción máxima de hasta 14 ppb en el AMM. También cabe mencionar que el impacto en este caso es más local que los escenarios que incluyen modificaciones en la emisión de NOx.

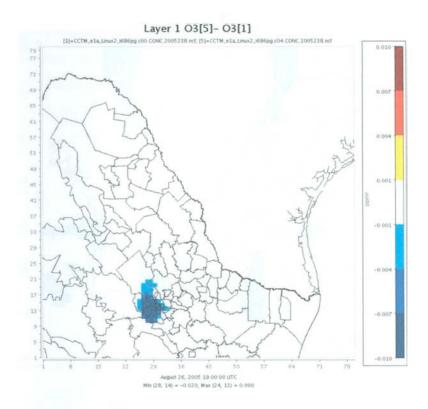


Figura 4.23 Mapa de la diferencia de concentración de O₃: caso de reducción de 50% de COV's.

Un escenario con reducción de 25% y 50% de reducción en la emisión de NOx y COV's, respectivamente (Escenario 6), se muestra en la Figura 4.24. Se observan incrementos de hasta 6 ppb al área correspondiente a Piedras Negras, Coahuila. El impacto en la mejora en la calidad del aire en el AMM con respecto a O₃, se ve disminuida con respecto al escenario anterior, al alcanzar una reducción máxima de 10 ppb en el AMM. Sin embargo, existe reducción viento abajo de dicha región, pero en esa zona la población beneficiada por la reducción es menor, ya que más del 80% de la población del estado de Nuevo León se encuentra en el AMM, y las regiones viento abajo están fuera de esta.

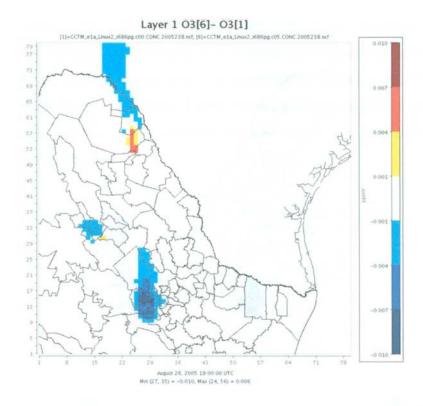


Figura 4.24 Mapa de la diferencia de concentración de O_3 : caso de reducción de 50% de COV's y 25% NOx.

En la Figura 4.25 y Figura 4.26 se presentan dos escenarios (7 y 8) que presentaron resultados muy similares. En el primero de ellos se propone una reducción de 50% en la emisión de NOx y COV's; en cuanto en el segundo, las reducciones fueron de 50% de NOx y de 25% de COV's. Se estimaron incrementos en el AMM de alrededor de 10 ppb, mientras que las reducciones máximas son de hasta 10 ppb, pero, como en el Escenario 6, esas reducciones se dan en viento abajo del AMM, reduciendo el impacto positivo que pudiera tener la estrategia en la salud de los habitantes de la región.

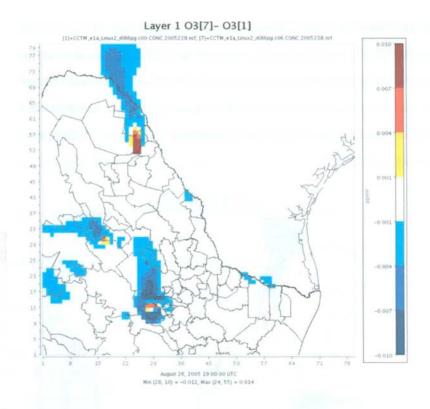


Figura 4.25 Mapa de la diferencia de concentración de O_3 : caso de reducción de 50% de COV's y 50% NOx.

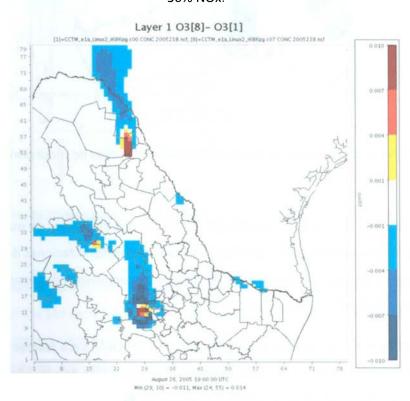


Figura 4.26 Mapa de la diferencia de concentración de O_3 : caso de reducción de 25% de COV's y 50% NOx.

El caso que presentó los peores resultados en la construcción de las isopletas fue en el que se propone una reducción de 50% de NOx, dejando los COV's iguales al caso base (Escenario 9). Los resultados para esta estrategia se muestran en la Figura 4.27. Se puede observar que las máximas reducciones (11 ppb), se estimaron fuera de la zona altamente poblada del AMM. Sin embargo, existen incrementos de hasta 20 ppb que impactan la zona metropolitana, en específico la zona de Santa Catarina (Celda 28,13).

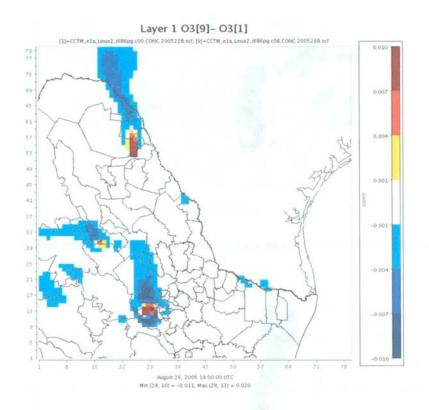


Figura 4.27 Mapa de la diferencia de concentración de O₃: caso de reducción de 50% de NOx.

Finalmente, se presentan series de tiempo que comparan los escenarios de mayor impacto en las emisiones de los precursores de O_3 para las ubicaciones de ciertas estaciones de interés dentro del AMM. La información presentada en las series de tiempo complementa a aquella discutida en los mapas de diferencias de concentración.

Se seleccionaron las estaciones Obispado y San Bernabé del SIMA para realizar el análisis de series de tiempo, ya que fue en estas locaciones donde se tuvo el mejor desempeño para reproducir el caso base. En la Figura 4.28 se muestran las series de tiempo correspondientes a la estación Obispado.

Se puede observar que los cambios en las emisiones de COV's (escenario 5) tienen su mayor efecto a concentraciones altas de O_3 . Las reducciones en emisiones de NOx (escenario 9) muestran un efecto a incrementar la concentración de O_3 , tanto a bajas concentraciones ($10 > O_3 > 40$; periodos nocturos) como a concentraciones altas ($80 > O_3$; periodos diurnos). En el escenario 7 (reducción en la emisión de 50% de NOx y 50% de COV's) el comportamiento fue similar al caso base en concentraciones altas y similar al escenario 9 a concentraciones bajas de O_3 .

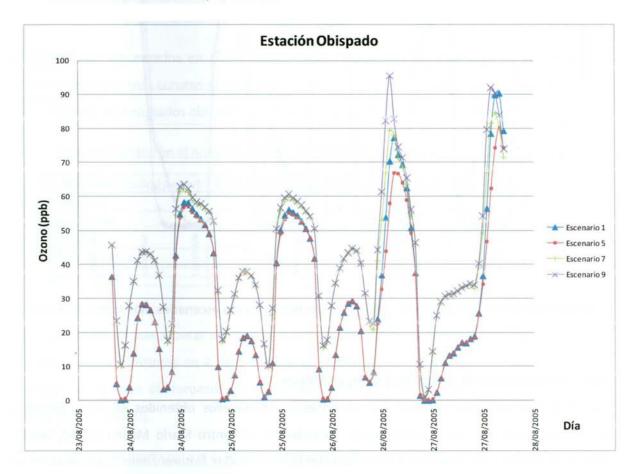


Figura 4.28 Serie de tiempo para la estación Obispado para escenarios más representativos.

La Figura 4.29 presenta las series de tiempo en comparación con el caso base para los escenarios 5, 7 y 9 en la estación San Bernabé. En esta gráfica se pueden observar resultados comparables con los obtenidos para la serie de tiempo de la estación Obispado. Es de interés el incremento de O_3 durante los períodos nocturnos al disminuir las emisiones de NOx. Esto es explicado por la menor disponibilidad de nitrógeno oxidado que pueda convertir O_3 a moléculas estables que eventualmente se convierten en un sumidero local de O_3 (p. ej., $NO_2 + O_3 \rightarrow NO_3 + O_2$).

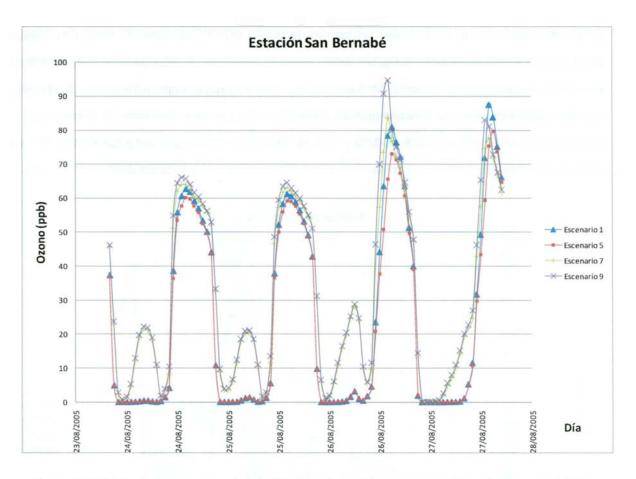


Figura 4.29 Serie de tiempo para la estación San Bernabé para escenarios más representativos.

4.6 Otros estudios de sensibilidad de O₃ en México

Los resultados obtenidos pueden ser comparados con aquellos obtenidos en otros estudios realizados en México, por ejemplo aquel realizado por el Centro Mario Molina (CMM, 2009), Potencial de Uso y los Impactos Ambientales del Empleo de Gas Natural como Carburante en el Valle de México y Monterrey. Se utilizó como caso base un episodio de alta contaminación por O₃, comprendiendo los días 10 al 16 de septiembre de 2005.

En dicho estudio se plantean escenarios de introduccion de vehículos impulsados por gas natural, en un escenario alto se plantea una reducción de 13% de las emisiones de NOx y 34% de las emisiones de COT del total de las emisiones en el AMM, teniendo los resultados mostrados en la Tabla 4.7.

Tabla 4.7 Cambio en el nivel máximo de O₃ con uso de Gas Natural Vehicular (CMM,2009).

O ₃ Máximo Diario (ppmv)	Caso Base (2020)	Escenario de Conversión	% de Cambio
La Pastora	0.096	0.101	5.2
San Nicolás	0.114	0.115	0.9
Obispado	0.070	0.078	11.4
Santa Catarina	0.100	0.105	5.0
San Bernabé	0.130	0.127	-2.3

Los resultados presentados en CMM (2009), se comparan con los obtenidos en este trabajo, donde el escenario más cercano al planteado es en que se proponen reducciones de 12.5 de NOx y 37.5 de COV's, los resultados obtenidos en el citado escenario se presentan en la Tabla 4.8.

Tabla 4.8 Cambio en el nivel máximo de O3 (Reducción de 12.5% NOx y 37.5% COV's).

O ₃ Máximo Diario (ppmv)	Caso Base (2005)	Escenario de Reducción	% de Cambio
La Pastora	0.072	0.070	-3.8
San Nicolás	0.076	0.073	-4.1
Obispado	0.077	0.073	-5.6
Santa Catarina	0.098	0.090	-7.9
San Bernabé	0.081	0.077	-4.4

Se puede observar que a pesar de proponer reducciones similares en los precursores de O_3 , los resultados fueron distintos en 4 de 5 estaciones de monitoreo, ya que sólo en la estación San Bernabé, ubicada en el Noroeste del AMM, ambos estudios predijeron una reducción en los niveles máximos de O_3 .

En otro estudio realizado para la Ciudad de México, por Torres-Jardón (2009), recopila información de otros estudios donde se discute la sensibilidad de la concentración de O3 a NOx y COV's en dicha región. Algunos (Los Alamos National Laboratory and Instituto Mexicano del Petróleo (1994), West et al. (2004), Sandoval et al. (2000, 2001)) concluyen que la atmósfera de la Ciudad de México es sensible a reducciones a NOx. Otros (Young et al. (1997), Forkel et al. (2004), García (2002), Lei et al. (2006), Tie et al. (2008)) encuentran esta misma atmósfera (Ciudad de México) sensible a reducciones de COV's.

Los resultados presentados en trabajos anteriores, en la Ciudad de México y el AMM, permiten observar la dificultad para predecir los efectos en las estrategias de control de emisiones contaminantes. Esto es de especial interés para conocer los efectos en la concentración de

contaminantes secundarios como lo es el O ₃ . Es por lo tanto importante complementar este
estudio con algunos posteriores que corroboren los resultados aquí obtenidos.

5 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1 Conclusiones

En este estudio se aplicó el modelo de calidad del aire CMAQ v.4.7.1, para el cual se evaluó estadísticamente su capacidad de reproducir un caso base. Se compararon los resultados para EPP, DPN, EBNP, DNP y el ENP contra valores guía. El modelo presentó un desempeño aceptable para todos los días, en especial para el 26 de agosto, donde todos los valores fueron mejores a los establecidos en los estándares. Esto da sustento a los resultados obtenidos en los escenarios propuestos de reducción de emisión de contaminantes.

Al analizar los resultados de los escenarios modelados se puede concluir que la concentración máxima diaria de O_3 en el AMM se incrementa al disminuir la emisión de NOx. Es decir el AMM presenta una atmósfera inhibida por NOx. En el episodio estudiado el incremento máximo en la concentración de O_3 en el AMM fue de 18 ppb. Sin embargo, las zonas rurales, dentro del dominio de modelación y viento abajo de las zonas de emisión, presentaron atmósferas limitadas por NOx, es decir a menor emisión de NOx menor concentración de O_3

Así mismo, se observó que la concentración máxima diaria de O₃ para el episodio simulado disminuye al reducir las emisiones de COV's. La máxima reducción en la concentración máxima diaria de O₃ se dio en la estación de monitoreo ambiental del Obispado el día 26 de agosto, pasando de 77 ppb en el caso base a 67 ppb cuando las emisiones de COV's se redujeron a la mitad con respecto al caso base. Una mayor reducción se alcanzó en la estación de Santa Catarina (Reducción de 14 ppb); sin embargo hay que tomar en cuenta que el desempeño para replicar el caso base en esa estación no fue aceptable.

Las reducciones en la concentración máxima de O₃ viento abajo de las principales zonas de emisión (AMM, Monclova, Piedras Negras y Saltillo) se mostraron insensibles a las reducciones en la emisión de COV's.

Los resultados presentados en este trabajo permiten tomar una decisión sobre las estrategias adecuadas para controlar la contaminación por altos niveles de O₃ en el AMM. Dada la sensibilidad que presenta por el O₃ en la atmósfera del AMM, se puede concluir que las mejores estrategias de control son aquellas que reducen la emisión de COV's.

5.2 Recomendaciones

Se recomienda hacer una aplicación del CMAQ en la región con una resolución horizontal mayor para reproducir mejor los fenómenos de transportes de contaminantes en las zonas donde la topografía dificulta la modelación adecuada con la resolución actual, por ejemplo de 4 km x 4 km en la horizontal.

Además de la refinación de la malla, es necesario repetir la metodología utilizada en este trabajo para otro episodio de alta contaminación por O₃ para demostrar que los resultados aquí expuestos son aplicables en diferentes épocas del año. Como una opción se encuentra un episodio para el mes de septiembre de 2005 (del 8 al 18 de septiembre), el cual forma parte del mismo nodo del árbol de regresión utilizado en este estudio.

Con el fin de contar con un inventario de emisiones con una mejor definición espacial para el lado mexicano del dominio, se recomienda incrementar los surrogados espaciales con los que se cuenta. Al sólo contar con el surrogado espacial de población para dispersar las emisiones en el SMOKE, existe un sesgo en la información que puede impactar negativamente en el desempeño del CMAQ.

Como complemento de este estudio, se recomienda realizar una evaluación económica de las mejores estrategias de reducción, evaluando para esto los impactos en salud generados por la reducción en la concentración máxima diaria de O₃ y concluyendo de esta forma la factibilidad económica de la realización de dichas estrategias de reducción. Para este caso sería necesario integrar la información temporal-espacial aquí presentada con la información disponible de población para el dominio analizado en este trabajo.

6 REFERENCIAS

Alamos-National-Laboratory-and-Instituto-Mexicano-del-Petroleo, L. (1994). Mexico City Air Quality Research Initiative. Report LA-12699.

Alvarez, F. O. (Enero de 2004). Inventario de emisiones para fuentes moviles para el área metropolitana de Monterrey basado en la experiencia de la zona metropolitana del valle de México. Monterrey, Nuevo Leon, México: ITESM.

Alvarez, L. L. (2002). Estudio del Efecto de la Contaminación Atmosférica Sobre la Frecuencia por Enfermedades Respiratorias en el AMM. Monterrey.

Arribas M. F., Rabanaque M.J., Martos Ma. C., Abad J. M., Alcalá T., Navarro F. (2001). *Efectos de la Contaminación Atmosférica sobre la Mortalidad Diaria en la Ciudad de Zaragoza, España.* México: Salud Publica México.

Bell, M., & Ellis, H. (2004). Sensitivity analysis of tropospheric ozone to modified biogenic emissions for the Mid-Atlantic region. *Atmospheric Environment*, 38, 1879–1889.

Bott, A. (1989). A positive definite advection scheme obtained by nonlinear renormalization of the advective fluxes. *Mon. Wea. Rev.*, 117, 1006-1015.

Boubel, R. W., Fox, D. L., Turner, D. B., & Stern, A. C. (1994). *Fundamentals of air pollution.* San Diego: Academic Press.

Brasseur, G. P., & Madronich, S. (1992). Chemistry-transport models. En K. E. Trenberth, *Climate System Modeling* (pág. 491). New York: Cambridge.

Brieman, L., Friedman, J. H., Olshen, R. A., & Stone, C. J. (1984). Classification and Regression Trees. *Wadsworth, Belmont, California*.

Byun, D. W., & Ching, J. K. (1999). Science Algorithms of the EPA Models 3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. EPA/600/R-99/030, US EPA, Washington DC.

Byun, D. W., Pleim, J. E., Tang, R. T., & Bourgeois, A. (1999). METEOROLOGY-CHEMISTRY INTERFACE PROCESSOR (MCIP) FOR MODELS-3 COMMUNITY MULTISCALE AIR QUALITY (CMAQ) MODELING SYSTEM. Atmospheric Modeling Division, National Exposure Research Laboratory, U.S. Environmental Protection Agency, Dyntel Corporation, Lockheed Martin/U.S. EPA Scientific Visualization Center, EPA-600/R-99/030, 12-1–12-91.

Byun, D., & Schere, K. L. (2006). Review of the Governing Equations, Computational Algorithms, and Other Components of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. Atmospheric Sciences Modeling Division, Air Resources Laboratory, National Oceanic and Atmospheric Administration, U. S. Environmental Protection Agency.

Centro-Mario-Molina. (2009). Potencial de Uso y los Impactos Ambientales del Empleo de Gas Natural como Carburante en el Valle de México y Monterrey.

Cohan, D. S., Hakami, A., Hu, Y., & Rusell, A. G. (2005). Nonlinear Response of Ozone to Emissions: Apportionment and Sensitivity Analysis. *Environmental Science & Technology*, 6739-6748Daniel S. Cohan, Amir Hakami, Yongtao Hu, Armistead G. Rusell.

Davidson AE., Klein DE., Settipane GA., Alario AJ. (1994). Acces to care among children visiting the emergency room with acute exacerbations of asthma. Annals of allergy.

DOF. (1994). Normas Referentes a la SSA México. DF.

DOF. (2002). Normas Referentes a la SSA México. DF.

DOF. (2005). Normas Referentes a la SSA México. DF.

Emery, C., Tai, E., & Yarwood, G. (2001). Enhanced Meteorological Modeling and Performance Evaluation for Two Texas Ozone Episodes. *Preparado para Texas Natural Resource Conservation Commission por ENVIRON International Corp. Novato, California.*

EPA. (1991). Guidance for Regulatory Application of the Urban Airshed Model (UAM). *Preparado* por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA), Office of Air Quality Planning.

Forkel, R., Smiatek, G., Hernandez, F., Iniestra, R., Rappengluck, B., & Steinbrecher, R. (2004). Numerical Simulations of Ozone Level Scenarios for Mexico City. *In Proceedings of the 84th American Meteorological Society (AMS) Annual Meeting (CD-ROM)*.

García, J. (2003). Manual: Multiscale Climate Chemistry Model (MCCM). México: INE.

García, R. (2002). Tesis Doctoral, Universidad Nacional Autonoma de México.

Geng, F., Zhao, C., Tang, X., Lu, G., & Tie, X. (2007). Analysis of ozone and VOCs measured in Shanghai: A case study. *Atmospheric Environment*, 41, 989–1001.

Grell G.A., Emei S., Stokwell W.R., Schoenmeyer T., Forkel R., Michalakes J., Knoche J.R., Seild W. (2000). Aplication of multiscale MM5/chemistry model to the complex terrain of the VOTLAP valley campaing. *Atmos. Environ*, 34 (9).

Grell, G. A., Dudhia, J., & Stauffer, D. R. (1995). A Description of the Fifth-Generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5). NCAR TECHNICAL NOTE, NCAR/TN-398 + STR, National Center for Atmospheric Research.

Gutierrez, J. (1997). Contaminación del aire; riesgos para la salud. México.

Gutierrez, J. R. (2003). Modelo de evaluación de estrategias de control de contaminación del aire por emisiones del transporte y su aplicación el área metropolitana de Monterrey. Monterrey: ITESM.

Hakami, A., Seinfeld, J. H., Chai, T., Tang, Y., Charmichael, G. R., & Sandu, A. (2006). Adjoint Sensitivity Analysis of Ozone Nonattainment over the Continental United States. *Environ*, 3855-3864.

Hernadez C.L., Tellez R.M., Sanín A.L., Lascaña N.M., Campos A., Romieu I. (2000). *Relación entre consultas a urgencias por enfermedad respiratoria y contaminación atmosférica en Ciudad Juárez, Chihuahua*. Salud Publica México.

Hudischewshyi, B., & Douglas, S. (1997). Classification of ozone episodes for four Southern cities according to transport characteristics. *Reporte final preparado por Systems Applications International para Southern Company Services*.

INE. (12 de Agosto de 2009). *Instituto Nacional de Ecología*. Recuperado el 23 de Marzo de 2010, de Instituto Nacional de Ecología: http://www.ine.gob.mx/calaire-informacion-basica/537-calaire-fuentes

Kleinman, L. I., Daum, P. H., Lee, Y.-N., Nunnermacker, L. J., Springston, S. R., Weinstein-Lloyd, J., y otros. (2001). Sensitivity of ozone production rate to ozone precursors. *Geophys. Res. Lett*, 2903-2906.

Lei, W., de Foy, B., Zavala, M., Volkamer, R., & Molina, L. (2006). Characterizing Ozone Production in the Mexico City Metropolitan Area: a Case Study Using a Chemical Transport Model. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 6, 7959-8009.

Lin, C.-J., Ho, T. C., Chu, H.-w., Yang, H., Chandru, S., Krishnarajanagar, N., y otros. (2005). Sensitivity analysis of ground-level ozone concentration to emission changes in two urban regions of southeast Texas. *Journal of Environmental Management*, 75, 315–323.

Lin, X., Trainer, M., & Liu, S. C. (1988). On the Nonlinearity of the Tropospheric Ozone Production. J. Geophys. Res., 15879-15888.

Mendoza, A. D. (1996). Aplicacion preliminar del modelo fotoquímico de calidad del aire CIT a la zona fornteriza México-EE.UU. Monterrey: ITESM.

Mendoza-Dominguez, A., Wilkinson, J. G., Yang, Y.-J., & Russell, A. G. (2000). Modeling and Direct Sensitivity Analysis of Biogenic Emissions Impacts on Regional Ozone Formation in the Mexico–U.S. Border Area. *AWMA* . 50: 21-31.

Morris, R. E., Koo, B., Lau, S., Tesche, T. W., McNally, D., Loomis, C., y otros. (2004). VISTAS Emissions and Air Quality Modeling – Task 4: Model Performance Evaluation and Model Sensitivity Tests for Three Phase I Episodes. *Reporte preparado por ENVIRON International Corporation, Novato, California*.

Napolenok, S. L., Cohan, D. S., T, O. M., & S, T. (2008). Extension and evaluation of sensitivity analysis capabilities in a photochemical model. *Elsevier*, 994-999.

Nevers, N. (2000). Ingeniería de control de la contaminación del aire. McGraw-Hill.

Olerud, D., & Sims, A. (2003). MM5 sensitivity modeling in support of VISTAS (Visibility Improvement—State and Tribal Association). Report prepared for the VISTAS Technical Analysis Workgroup by Baron Advanced Meteorological Systems, LLC.

Pleim, J. E., & Chang, J. (1992). A non-local closure model for vertical mixing in the convective boundary layer. *Atmos. Env.*, 26A, 965-981.

Reynoso, A. G. (2003). Manual del Multiscale Climatic Chemistry Model (MCCM). México: INE.

Roselle, S. J., Pierce, T. E., & Shere, K. L. (1991). The Sensitivity of Regional Ozone Modeling to Biogenic Hydrocarbons. *J. Geophys. Res.*, 96, 7371-7394.

Rusell, A. (1997). REGIONAL PHOTOCHEMICAL AIR QUALITY MODELING: Model Formulations, History and State of the Science.

Sandoval, J., Jaimes, J., Zúñiga, A., Marroquín, O., Ortiz, R., Gonzalez, E., y otros. (2000). Comparison of Results from Outdoor Experiments with Smog Chambers in Los Angeles, CA, and Mexico City. *J. Mex. Chem. Soc.*, 44, 299-304.

Sandoval, J., Marroquín de la, R., Jaimes-Ló pez, J., Zúñiga, V., González, O., & Guzmán, L. (2001). Effect of Hydrocarbons and Nitrogen Oxides on Ozone Formation in Smog Chambers Exposed to Solar Irradiance of Mexico City. *Atmósfera*, 14, 17-27.

Seinfield, J. H., & Pandis, S. N. (2006). *Atmospheric chemistry and physics*. USA: John Wiley and Sons.

SEMARNAT. (2005). Inventario de Emisiones de los Estados de Frontera Norte de México, 1999. Mexico: INE-SEMARNAT.

SEMARNAT. (2006). Inventario Nacional de Emisiones de México, 1999. México: INE-SEMARNAT.

SEMARNAT, Gobierno de Nuevo León. (2009). *Programa de gestión para mejorar la calidad del aire del área metropolitana de Monterrey 2008-2012*. Monterrey: SEMARNAT.

Sillman, S. (1995). The use of NOy, H2O2, and HNO3 as indicators for ozone-NOx-hydrocarbon sensitivity in urban locations. *J. Geophys. Res*, 14175-14188.

Sillman, S., Logan, J. A., & Wofsy, S. C. (1990). The Sensitivity of Ozone to Nitrogen Oxides and Hydrocarbons in Regional Ozone Episodes. *J. Geophys. Res.*, 1837-1851.

SIMA. (2011A). Estaciones de Monitoreo: Sistema Integral de Monitoreo Ambiental. Recuperado el 27 de 06 de 2011, de http://www.nl.gob.mx/?P=med_amb_mej_amb_sima_estacion

SIMA. (2011B). Estadisticas: Por contaminantes en días sobre la norma (1993-2010). Sistema Integral de Monitoreo Ambiental. Recuperado el 27 de 06 de 2011, de http://www.nl.gob.mx/?P=med_amb_mej_amb_sima_estadisti.base/TABLA_POR_CONTAMINANT E-DSN(HISTORIAL).pdf

Simpson, D. (1995). Biogenic emissions in Europe 2. Implications for ozone control strategies. *J. Geophys. Res.*, 100, 22891-22906.

Strauss S. W., Mainwaring S. J. (1990). Contaminación del Aire, Causas, Efectos y Soluciones. México: Trillas.

Tie, X., Madronich, S., Li, G., Ying, Z., Zhang, R., Garcia, A., y otros. (2007). Characterization of Chemical Oxidants in Mexico City: a Regional Chemical Dynamical Model (WRF-Chem) Study. *Atmos. Environ*, 41, 1989-2008.

Torres-Jardon. (2009). Assessment of the Ozone-Nitrogen Oxide-Volatile Organic Compound Sensitivity of Mexico City through an Indicator Based Approach: Measurements and Numerical Simulations Comparison. *UNAM*.

USEPA. (2008). Air Quality Modeling Plataform for the Ozone National Ambient Air Quality Standard Final Rule Regulatory Impact Analysis . *U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Air Quality Assessment Division*, EPA 454/R-08-003.

USEPA. (2003). User's Guide to Mobile6.1 and Mobile6.2 Mobile Source Emission Factor Model. Office of Transportation and Air Quality, EPA420-R-03-010, Ann Arbor, MI.

Vanoye, A., & Mendoza, A. (2009). Mesoscale Meteorological Simulations of Summer Ozone Episodes in Mexicali and Monterrey, Mexico: Analysis of Model Sensitivity to Grid Resolution and Parameterization Schemes. *Water Air Soil Pollut: Focus 9*, 185-202.

Vukovich, J., & Pierce, T. (2002). The Implementation of BEIS3 within the SMOKE Modeling Framework. *United States Environmental Protection Agency Emissions Inventory Conference, Atlanta, GA*.

Wark, K. (2007). Contaminacion del aire. Origen y control. Mexico: Limusa.

West, J., Zavala, M., Molina, L., Molina, M., San Martín, F., McRae, J., y otros. (2004). Modeling Ozone Photochemistry of Hydrocarbon Emissions in the Mexico City Metropolitan Area. *J. Geophys. Res.*, 109, D19312.

Yang, Y.-J., Wilkinson, J. G., & Russell, A. G. (1997). Fast, Sirect Sensitivity Analysis of Multidimensional Photochemical Models. *Environ*, 2859-2868.

Yarwood, G., Rao, S., Yocke, M., & Whitten, G. (2005). Updates to the Carbon Bond Chemical Mechanism: CB05. *Final Report to the US EPA, RT-0400675.*, Disponible en: http://www.camx.com/publ/pdfs/CB05_Final_Report_120805.pdf.

Young, A., Betterton, E., & Saldivar, R. (1997). Photochemical Box Model for Mexico City. *Atmósfera*, 10, 161-178.

APÉNDICE A: NOMENCLATURA

c_p	Calor específico a presión constante para aire seco
c_{ν}	Calor específico a volumen constante para aire seco
C_i	Concentración de la especie química i
D_u	Difusión horizontal
D_{ν}	Difusión vertical
D_{w}	Mezclado vertical debido a la turbulencia en la capa límite planetaria o ajuste seco
	convectivo
D_{θ}	Difusión de diferencia angular
D_{θ}	Divergencia de masa, o deformación horizontal
e	Parámetro horizontal de Coriolis, equivalente a $2\Omega\cos\lambda$
E _i	Es la tasa de emisión por fuentes puntuales de la especie i
f	Parámetro de Coriolis
g	Aceleración de la gravedad (9.8 m/s²)
k	Es el tensor de difusividad turbulenta
m	Factor de escalamiento del mapa
P	Presión en un determinado punto en un determinado tiempo
p _s	Presión en la superficie
p_t	Presión en el borde superior del modelo
p*	p_s - p_t
p_0	Presión en el estado de referencia
p'	Presión de perturbación
\dot{Q}	Razón de calentamiento adiabático por unidad de masa
r	Radio de la tierra
R	Constante de gas ideal para aire seco (287 J kg ⁻¹ k ⁻¹)
R_i	Es la velocidad neta de producción química de la especie i
t	Tiempo
T	Temperatura en un determinado punto para un determinado tiempo
T_o	Temperatura en el estado de referencia
T'	Temperatura de perturbación
u	Componente de la velocidad de viento en dirección este

Nomenclatura 87

- u Campo de viento advectivo (tridimensional)
- U Velocidad de fondo de fluido
- v Componente de la velocidad de viento en dirección norte
- Vector horizontal de viento
- Velocidad vertical o función de peso para reducir el mezclado cerca del borde superior de la capa de mezclado
- x Coordenada de la malla horizontal, cuyo valor generalmente asciende en dirección este
- y Coordenada de malla horizontal, cuya magnitud asciende generalmente en dirección norte
- z Altura sobre la superficie
- α Diferencia entre longitud y longitud central ($\phi \phi_c$)
- $\Delta\theta$ Diferencial de temperatura potencial
- Δz Desplazamiento
- y Razón de calores específicos (c_p y c_v) para aire seco
- θ Temperatura potencial; también ángulo existente entre el eje y y la dirección norte para la fuerza de Coriolis
- θ_0 Temperatura potencial en el estado de referencia
- λ Longitud
- π Cantidad adimensional equivalente a 3.1416
- ρ Densidad del aire
- ρ_0 Densidad del aire en el estado de referencia
- ρ' Densidad de perturbación
- σ Coordenada vertical adimensional del modelo
 - $\dot{\sigma}$ Velocidad vertical en coordenadas sigma (σ)
- φ Longitud
- φ_c Longitud central
- Ω Velocidad angular de la Tierra (7.2722 x 10⁻⁵ s⁻¹)

88

APÉNDICE B: ESPECIACIÓN CB - V

Tabla 6.1 Nombres de las especies para el mecanismo CB05 (Yarwood et al., 2005).

Nombre de la		No do átomos do
especie o	Descripción	No. de átomos de carbono
pseudo especie		Carbono
NO	Nitric oxide	0
NO2	Nitrogen dioxide	0
O3	Ozone	0
0	Oxygen atom in the O3(P) electronic state	0
O1D	Oxygen atom in the O1(D) electronic state	0
ОН	Hydroxyl radical	0
HO2	Hydroperoxy radical	0
H2O2	Hydrogen peroxide	0
NO3	Nitrate radical	0
N2O5	Dinitrogen pentoxide	0
HONO	Nitrous acid	0
HNO3	Nitric acid	0
PNA	Peroxynitric acid (HNO4)	0
CO	Carbon monoxide	1
FORM	Formaldehyde	1
ALD2	Acetaldehyde	2
C2O3	Acetylperoxy radical	2
PAN ·	Peroxyacetyl nitrate	2
ALDX	Propionaldehyde and higher aldehydes	2
CXO3	C3 and higher acylperoxy radicals	2
PANX	C3 and higher peroxyacyl nitrates	2
XO2	NO to NO2 conversion from alkylperoxy (RO2) radical	0
XO2N	NO to organic nitrate conversion from alkylperoxy (RO2) radical	0
NTR	Organic nitrate (RNO3)	1
ETOH	Ethano	2
CH4	Methane	1
MEO2	Methylperoxy radical	1
MEOH	Methanol	1
MEPX	Methylhydroperoxide	1
FACD	Formic acid	1
ETHA	Ethane	2
ROOH	Higher organic peroxide	1
AACD	Acetic and higher carboxylic acids	2

Especiación CB - V

Continuación ta	bla 6.1		
Nombre de la especie o Descripción eseudoespecie		No. de átomos de carbono	
PACD	Peroxyacetic and higher peroxycarboxylic acids	2	
PAR	Paraffin carbon bond (C-C)	1	
ROR	Secondary alkoxy radical	0	
ETH	Ethene	2	
OLE	Terminal olefin carbon bond (R-C=C)	2	
IOLE	Internal olefin carbon bond (R-C=C-R)	4	
ISOP	Isoprene	5	
ISPD	Isoprene product (lumped methacrolein, methyl vinyl ketone, etc.)	4	
TERP	Terpene	10	
TOL	Toluene and other monoalkyl aromatics	7	
XYL	Xylene and other polyalkyl aromatics	8	
CRES	Cresol and higher molecular weight phenols	8	
TO2	Toluene-hydroxyl radical adduct	7	
OPEN	Aromatic ring opening product	4	
CRO	Methylphenoxy radical	7	
MGLY	Methylglyoxal and other aromatic products	3	
SO2	Sulfur dioxide	0	
SULF	Sulfuric acid (gaseous)	0	

90

