

ACTUALIZACIÓN DEL INVENTARIO NACIONAL DE EMISIONES DE 2013 PARA LA MODELACIÓN DE LA CALIDAD DEL AIRE EN EL CENTRO DE MÉXICO

Updating of the 2013 National Emissions Inventory for air quality modeling in Central Mexico

José Alejandro RODRÍGUEZ ZAS y José Agustín GARCÍA REYNOSO*

Instituto de Ciencias de la Atmósfera y Cambio Climático, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito de la Investigación Científica s/n, Ciudad Universitaria, 04510 Ciudad de México, México.

*Autor para correspondencia: agustin@atmosfera.unam.mx

(Recibido: enero 2020; accepted: septiembre 2020)

Palabras clave: contaminación atmosférica, factores de escalamiento, inventario de emisiones, modelación numérica de la atmósfera, WRF-Chem.

RESUMEN

Los inventarios de emisiones de contaminantes atmosféricos constituyen un parámetro de entrada imprescindible para los modelos de calidad del aire. Durante su proceso de elaboración, existen incertidumbres que conducen a errores en las simulaciones numéricas, siendo indiscutible la necesidad de mejorar continuamente la precisión de sus datos o ajustarlos a las condiciones reales que intenta describir. En este trabajo se aplicó el modelo de distribución espacial, temporal y de especiación química (DiE-TE) al Inventario Nacional de Emisiones de México de 2013 para obtener una base de datos desagregada espacial y temporalmente, lista para la modelación numérica con el modelo Weather Research and Forecasting with Chemistry (WRF-Chem) en el Centro de México. Se evaluó el desempeño del modelo en un episodio de contingencia ambiental por ozono ocurrido del 15 al 21 de mayo de 2017, a partir de la comparación con observaciones de estaciones de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico de la Ciudad de México. Las métricas estadísticas mostraron baja correlación entre el modelo y las mediciones para todas las variables analizadas y se decidió actualizar el inventario a partir de una metodología no paramétrica de factores de escalamiento. Esto permitió obtener una mejor correlación con valores del modelo más próximos a las observaciones y que describen acertadamente el comportamiento espacial y temporal de las variables. Los ajustes realizados al inventario se validaron mediante su aplicación a otro caso de contingencia ambiental del 14 al 17 de marzo de 2016, apreciándose mejoras considerables en el desempeño del modelo.

Key words: atmospheric pollution, scale factors; emission inventory, atmospheric numerical modeling, WRF-Chem.

ABSTRACT

Air pollutant emissions inventories are an essential input parameter for air quality modeling. During its elaboration process, there are uncertainties that cause errors in numerical simulations. The need to continually improve data accuracy or adjust it to the actual conditions being described is indisputable. In this work, the spatial,

temporal, and chemical speciation distribution model (DiETE) was applied to the 2013 Mexico National Emissions Inventory in order to obtain a spatially and temporarily disaggregated database, ready for numerical modeling with the Weather Research and Forecasting Model with Chemistry (WRF-Chem) in Central Mexico. Also, the model performance was evaluated for ozone in an environmental contingency episode that took place between May 15 and 21, 2017, based on the comparison with stations observations from Mexico City's Red Automática de Monitoreo Atmosférico (automatic air quality monitoring network). Statistical metrics showed lower correlation for all variables analyzed and it was decided to update the inventory through a nonparametric methodology based on scale factors. This led us to obtain statistical parameters with larger correlations and model values closer to the observations, which accurately describe the spatial and temporal behavior of the variables. The adjustments made to the inventory were validated through its application to another case of environmental contingency from March 14-17, 2016, with considerable improvements in the performance of the model.

INTRODUCCIÓN

La contaminación del aire es un problema muy importante que enfrentan los países del mundo y un reto prioritario para la sociedad actual. México no es una excepción en este sentido. El Inventario Nacional de Emisiones para el año 2013 (INEM-2013) indica que se emitieron a la atmósfera 32.8 Gg de contaminantes a nivel nacional, 59 % provenientes de fuentes de área, 31 % de fuentes móviles y 10 % de fuentes fijas (INECC 2018). Existen serias afectaciones en la calidad del aire de las principales zonas metropolitanas del país, con especial atención a la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM), donde los contaminantes criterio ozono (O_3) y partículas suspendidas con diámetro inferior a 10 μm (PM_{10}) son responsables de casi la totalidad de los episodios de alta contaminación, durante los cuales se alcanzan concentraciones muy elevadas que resultan dañinas para la salud de la población (SEMARNAT 2015). Por ende, la gestión de la calidad del aire en México y específicamente en la ZMVM ha adquirido gran relevancia.

Los modelos de calidad del aire (MCA) son una poderosa herramienta para estudiar el transporte y la dinámica de los contaminantes atmosféricos, ya que simulan los procesos físicos y químicos que influyen en su comportamiento y distribución. Esto permite evaluar el estado de la calidad del aire en zonas de interés y adoptar las medidas de control necesarias para salvaguardar a la población y reducir su exposición a altas concentraciones de contaminantes (Turtós et al. 2013).

Un componente esencial de los MCA son los inventarios de emisiones (IE) de contaminantes atmosféricos, elaborados por autoridades ambientales,

los cuales contienen emisiones de los principales contaminantes criterio generadas en un área (por lo general un país) provenientes de todas las fuentes (puntuales, área y móviles) y sectores (industria, transporte, comercio, servicios, hogares, vegetación, suelo) (SEMARNAT 2015). Estos IE desempeñan decisivo en la eficiencia del proceso de simulación y la calidad de sus resultados, ya que de ellos se obtienen bases de datos de emisiones (BDE) que sirven como condiciones iniciales y de frontera para los MCA (Huang et al. 2011).

Sin embargo, en el proceso de elaboración de los IE se presenta un sinnúmero de incertidumbres (Yumimoto y Uno 2006, Lumbreras et al. 2015) que no están cuantificadas o no son reportadas por sus autores y producen errores en las simulaciones numéricas (IPCC 2000, Hao et al. 2002, Streets et al. 2003, Chang y Hanna 2004, Borrego et al. 2008, Schultz 2008, Raadgever et al. 2011, Miller et al. 2012). Por ello se requiere el desarrollo continuo de metodologías para actualizar y ajustar sus datos (Lumbreras et al. 2009, Li et al. 2010). En este sentido, Fujita et al. (1992), CARB (1997) y Funk et al. (2001) emplearon métodos de arriba hacia abajo (*top-down*) basados en mediciones de concentraciones de contaminantes en horarios de la mañana junto con factores de emisión; Watson et al. (2001) utilizaron técnicas de equilibrio químico de masas y especiación de compuestos orgánicos volátiles (COV) para estimar las contribuciones relativas de emisiones de diferentes fuentes; Li et al. (2010) aplicaron un método de optimización global basado en un algoritmo genético (Holland 1975, Goldberg 1989) para actualizar un IE en China para su uso en el Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Model; y Brown (1993), Mulholland y Seinfeld

(1995), Chang et al. (1997), Mendoza-Domínguez y Russel (2001), Mannschreck et al. (2002), Hakami et al. (2005), Gilliland et al. (2006), Yumimoto y Uno (2006), Elbern et al. (2007), Napelenok et al. (2008), Kurokawa et al. (2009), Saide et al. (2009), entre otros, emplearon diferentes técnicas de modelación inversa de la calidad del aire, comparando directamente los resultados de las simulaciones numéricas con mediciones disponibles de concentraciones de distintos contaminantes.

En el caso de México, Streit y Guzmán (1994, 1996) encontraron que las emisiones de COV y monóxido de carbono (CO) eran subestimadas en la ZMVM, y propusieron que los datos disponibles se multiplicaran por un factor de 4 para el caso de COV a fin de obtener resultados aceptables en la modelación de O₃ con MCA. Arriaga-Colina et al. (2004) utilizaron mediciones de concentraciones matutinas de COV, CO y óxidos de nitrógeno (NO_x) en la ZMVM para obtener las razones COV/NO_x y CO/NO_x, y demostraron que las reportadas en el INEM-1998 subestimaban los valores reales y debían ser incrementadas por factores de 2 y 3, respectivamente. West et al. (2004) compararon directamente las salidas del modelo del California Institute of Technology (CIT) empleando como entrada el INEM-1998, con mediciones realizadas en la campaña IMADA de 1997 para la ZMVM; concluyeron que el modelo subestimaba las concentraciones de los contaminantes analizados y propusieron incrementos a las emisiones por factores de 3 para COV y de 2 para CO. Hernández (2006) utilizó modelación inversa con el MCA Multiscale Climate Chemistry Model (MCCM) para ajustar emisiones de hidrocarburos de la ZMVM en el INEM-1998, considerando la ubicación geográfica de las fuentes. Mendoza y García (2011) también emplearon modelación inversa para escalar el IE de 1995 para la Zona Metropolitana de Guadalajara, Jalisco, México, mediante factores de ajuste, comparando las salidas del modelo CIT con mediciones. Y Trejo (2017) utilizó una metodología para escalar las emisiones del INEM-2008 y simular las concentraciones de O₃ en la ZMVM con el modelo Weather Research and Forecasting Model with Chemistry (WRF-Chem), sin ajustar las emisiones de COV.

Otra limitación de los IE radica en que, generalmente, poseen una resolución espacial y temporal que impide su utilización directa en MCA, razón por la cual García-Reynoso et al. (2018) presentan y validan el modelo de distribución espacial, temporal y de especiación química (DiETE) aplicado al INEM-2008 para desagregarlo y obtener una BDE lista para su uso

en MCA en México, mientras que el INECC (2017) aplica una metodología similar al INEM-2013. En ambas investigaciones se recomienda utilizar las BDE obtenidas en MCA para evaluar la calidad de sus datos en casos de estudio reales.

Teniendo en cuenta lo anterior y en una primera instancia, en este trabajo se aplica el DiETE al INEM-2013 para obtener una BDE útil para realizar simulaciones numéricas con WRF-Chem en el Centro de México, en periodos de tiempo correspondientes a contingencias ambientales por O₃ ocurridas en la ZMVM. Se evalúa el desempeño del modelo a partir de una comparación con estaciones de monitoreo disponibles. Sin embargo, al presentarse una baja correlación en las métricas estadísticas calculadas, se decide actualizar el INEM-2013 a partir de una metodología no paramétrica basada en la obtención continua de factores de escalamiento, la cual se describe en la presente investigación y se aplica al área de interés, aspecto en el cual radica su novedad.

MATERIALES Y MÉTODOS

Área de estudio

El área de estudio abarca la región denominada Centro de México, que incluye los territorios pertenecientes a la Ciudad de México y los estados de México, Morelos, Hidalgo, Tlaxcala y Puebla (Fig. 1). Dentro de ella reviste especial interés la ZMVM, una

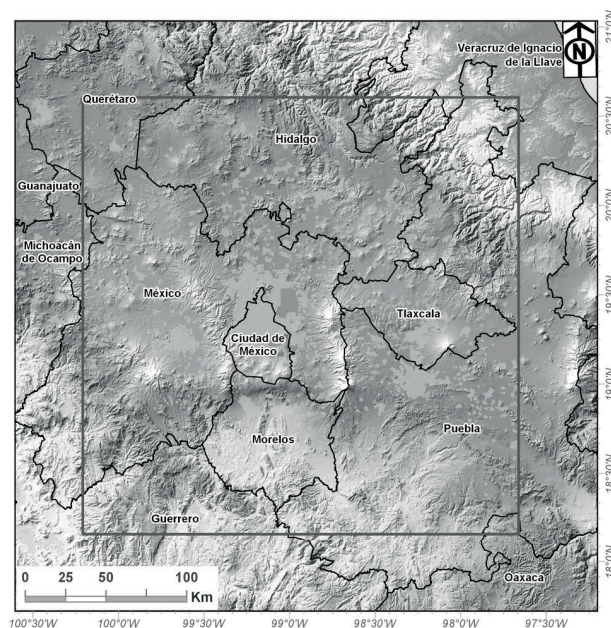


Fig. 1. Área de estudio.

de las regiones más contaminadas del país, la cual se ubica en un valle a más de 2200 m de altura con factores geográficos y orográficos que dificultan la dispersión de contaminantes. Éstos son emitidos en un 30 % por sus cinco millones de autos registrados, cuyas tecnologías tienen, en promedio, más de 12 años de antigüedad; además, deben considerarse las emisiones provenientes del Estado de México, que son transportadas a la ZMVM por efectos del viento. El centro geográfico de esta zona se ubica en la confluencia del paralelo 19° 30' N con el meridiano 99° 02' O (SEMARNAT 2002).

Modelo WRF-Chem y su configuración

En este estudio se empleó el modelo de mesoescala de nueva generación Weather Research and Forecasting with Chemistry (WRF-Chem, versión 3.9.1.1). Este modelo tiene la capacidad de simular las emisiones, transporte, mezcla y transformaciones químicas de los gases traza y aerosoles de manera acoplada con la meteorología dentro de un único sistema de coordenadas horizontales y verticales. No utiliza interpolaciones espaciotemporales y es útil para realizar estudios de calidad del aire a escala regional y global (Grell et al. 2005, Fast et al. 2006).

Para las simulaciones numéricas se construyó un dominio de modelación que cubre la región Centro de México, en el cual se ubicó una malla de 88×88 celdas con una resolución horizontal de 3×3 km (Fig. 2), tomándose en cuenta 27 niveles verticales.

Se consideraron dos periodos de tiempo: el primero, del 15 al 21 de mayo de 2017, se utilizó para evaluar el desempeño del WRF-Chem con el IE original y posteriormente con el actualizado; el segundo,

del 14 al 17 de marzo de 2016, se usó para validar la utilidad de los factores de escalamiento obtenidos, teniéndose en cuenta la activación del Programa para Contingencias Ambientales Atmosféricas (PCAA) en 2017 (Cuadro I) y 2016 (Cuadro II). En esta investigación se utiliza el tiempo en hora local.

En el primer caso se produjo un episodio de alta contaminación por O_3 que comenzó el 15 de mayo de 2017 a las 16:00 horas, cuando el Índice Metropolitano de la Calidad del Aire (IMECA) registró en la estación Ajusco Medio (AJM) un valor de 151, clasificado como de muy mala calidad, alcanzándose un máximo de 186 el 20 de mayo a las 17:00 horas en AJM. Las concentraciones horarias de O_3 (Fig. 3) llegaron a cifras cercanas a 180 ppb en varias estaciones de la Red Automática de Monitoreo Atmosférico (RAMA), muy altas y dañinas para la salud, superando considerablemente la Norma Oficial Mexicana NOM-020-SSA1-2014 (SSA 2014) de 95 ppb durante cada uno de los siete días que duró la contingencia ambiental, la más prolongada desde que se aplica el PCAA (1992). Este evento estuvo relacionado con la presencia de un sistema de alta presión sobre la zona de estudio, el cual propició condiciones de estabilidad atmosférica muy favorables para la formación y acumulación de O_3 y adversas para la dispersión de sus precursores, esto es, fuerte radiación solar, vientos débiles, altas temperaturas, escasas lluvias y limitado transporte de humedad (SEMARNAT 2017).

En el segundo caso el contaminante que desencadenó la contingencia ambiental también fue el O_3 , al alcanzarse un valor IMECA de 194 en la estación Cuajimalpa (CUA) el 14 de marzo de 2016 a las 16:00 horas, el cual llegó a un máximo de 203 una hora después en ese sitio. Las concentraciones horarias máximas de O_3 alcanzaron los 203 ppb en CUA, mientras que en otras estaciones de la RAMA se observaron picos que fluctuaron entre 120 y 160 ppb (Fig. 4), condiciones que indican una muy mala calidad del aire en la ZMVM de acuerdo con el índice IMECA. Este episodio de cuatro días también estuvo relacionado con un sistema de alta presión y condiciones de estabilidad atmosférica (CAME 2016), teniendo además la particularidad de contribuir a una actualización del PCAA, ya que se eliminó la fase de precontingencia ambiental existente hasta entonces (SEDEMA 2016).

Las condiciones meteorológicas iniciales y de frontera empleadas en WRF-Chem se generaron a partir de los datos obtenidos del Global Forecast System (GFS) desarrollado por los National Centers for Environmental Prediction (NCEP), el cual brinda información de diferentes variables con resolución espacial de $1^\circ \times 1^\circ$ y temporal de 6 h.

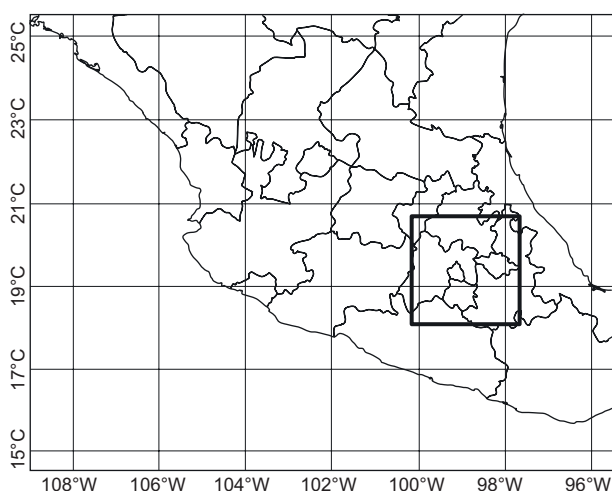


Fig. 2. Dominio de modelación.

CUADRO I. ACTIVACIÓN DEL PROGRAMA PARA CONTINGENCIAS AMBIENTALES ATMOSFÉRICAS (PCAA) EN LA ZMVM EN 2017.

Contaminante	Valor IMECA	Fecha y hora de activación	Valor IMECA	Fecha y hora de la concentración máxima	Valor IMECA	Fecha y hora de desactivación
PM ₁₀	153	6-ene (09:00)	172	6-ene (11:00)	132	7-ene (09:00)
O ₃	151	15-may (16:00)	186	20-may (17:00)	104	21-may (19:00)
O ₃	162	22-may (15:00)	183	23-may (18:00)	105	24-may (18:00)
PM ₁₀	154	14-dic (11:00)	162	14-dic (14:00)	147	15-dic (09:00)

IMECA: Índice Metropolitano de Calidad del Aire.

CUADRO II. ACTIVACIÓN DEL PROGRAMA PARA CONTINGENCIAS AMBIENTALES ATMOSFÉRICAS (PCAA) EN LA ZMVM EN 2016.

Contaminante	Valor IMECA	Fecha y hora de activación	Valor IMECA	Fecha y hora de la concentración máxima	Valor IMECA	Fecha y hora de desactivación
O ₃	194	14-mar (16:00)	203	14-mar (17:00)	136	17-mar (16:00)
O ₃	156	05-abr (17:00)	156	05-abr (17:00)	127	06-abr (17:00)
O ₃	161	02-may (15:00)	192	04-may (16:00)	127	05-may (17:00)
O ₃	157	14-may (17:00)	157	14-may (17:00)	69	15-may (15:00)
O ₃	178	20-may (15:00)	188	20-may (16:00)	133	21-may (17:00)
O ₃	151	24-may (15:00)	151	24-may (15:00)	49	24-may (21:00)
O ₃	165	27-may (15:00)	165	27-may (15:00)	109	28-may (18:00)
O ₃	155	31-may (16:00)	161	31-may (16:00)	115	01-jun (18:00)
O ₃	152	08-jul (17:00)	152	08-jul (17:00)	88	09-jul (15:00)
O ₃	151	11-ago (16:00)	158	11-ago (17:00)	127	12-ago (17:00)

IMECA: Índice Metropolitano de Calidad del Aire.

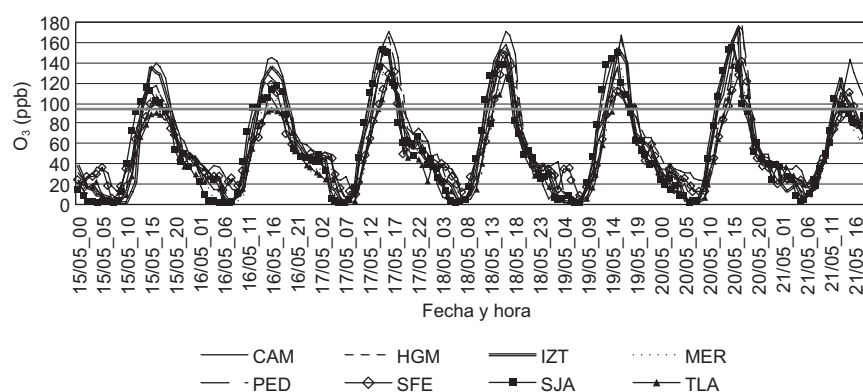


Fig. 3. Series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017). Se señala el valor de la NOM-020-SSA1-2014 (95 ppb).

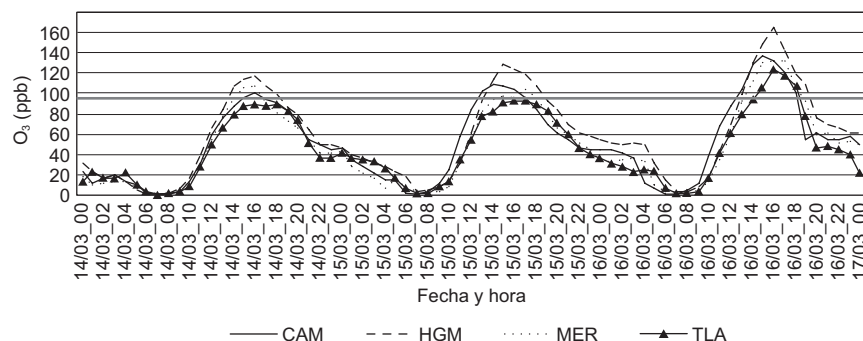


Fig. 4. Series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016). Se señala el valor de la NOM-020-SSA1-2014 (95 ppb).

CUADRO III. PARAMETRIZACIONES EMPLEADAS EN LA MODELACIÓN CON WRF-CHEM.

Proceso	Referencia
Capa límite planetaria	Yonsei University (YSU, Hong et al. 2006)
Capa superficial	MM5 Similarity (Zhang y Anthes 1982)
Microfísica	WRF Single-Moment class 5 (WSM5, Hong et al. 2004)
Uso de suelos	Noah Land-Surface Model (LSM, Chen y Dudhia 2001)
Radiación de onda larga	Rapid Radiative Transfer Model (RRTM, Mlawer et al. 1997)
Radiación de onda corta	MM5 (Dudhia 1989)
Cúmulos	Kain-Fritsch (Kain y Fritsch 1993, Kain 2004)
Mecanismo químico	Regional Acid Deposition Model v2 (RADM2, Stockwell et al. 1990)
Interacción Aerosoles-radiación	Activo aer_ra_feedback (Forkel et al. 2012)

La configuración del modelo en cuanto a parametrizaciones físicas y químicas se muestra en el **cuadro III**. Se destaca la utilización del mecanismo Regional Acid Deposition Model versión 2, (RADM2; Stockwell et al. 1990) para analizar la química en fase gaseosa, en el cual la distribución de emisiones por especies químicas se determina con base en la reactividad al radical hidroxilo (OH). Considera 21 especies inorgánicas y 42 orgánicas que intervienen en 29 reacciones químicas inorgánicas (nueve fotoquímicas) y 107 orgánicas (12 fotoquímicas). Se empleó un tiempo de precalentamiento de 24 h y las salidas del modelo se almacenaron cada hora.

Metodología para la actualización del inventario de emisiones

En este estudio se utilizó el INEM-2013 proporcionado por la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT), el cual cuenta con la clasificación de las emisiones de todas las fuentes fijas, móviles y de área, en sus diferentes categorías, para la ZMVM y México en general. Incluye las emisiones anuales por municipio de los principales contaminantes que afectan la calidad del aire o que son precursores de contaminantes secundarios: CO, NO_x, dióxido de azufre (SO₂), amoníaco (NH₃), partículas suspendidas con diámetro menor a 10 µm (PM₁₀) y 2.5 µm (PM_{2.5}), y COV, entre otros (INECC 2017).

Para obtener una BDE útil en MCA, se aplicó al INEM-2013 la metodología descrita en el modelo DiETE (INECC 2017, García-Reynoso et al. 2018), en el cual la distribución espacial de emisiones en cada celda del dominio de modelación se realiza con base en datos de población, cobertura de suelo y ubicación de industrias; para fuentes móviles, se considera la fracción de la malla correspondiente a las vialidades y carreteras; para la distribución temporal se emplean los códigos fuente Source Classification Codes (SCC) de la United States Environment

Protection Agency (US-EPA), que contienen perfiles temporales mensuales, semanales y diarios por tipo de fuente.

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

Se obtuvieron archivos diarios en formato NetCDF (Rew y Davis 1990) con información de la distribución espacial, temporal y química de las emisiones de las especies para el mecanismo RADM2, en el dominio de modelación definido. Sin embargo, al realizar simulaciones numéricas con la BDE obtenida, los resultados del modelo presentaron una baja correlación con las mediciones, como se muestra en secciones posteriores. Esto podía preverse, teniendo en cuenta que el IE corresponde a 2013 y la modelación a 2017; además, en su elaboración, se emplean factores de emisión, perfiles temporales y especiación de compuestos orgánicos que no consideran las características del área de interés, sino que provienen de estimaciones de la US-EPA. Asimismo, la incertidumbre en los datos del IE no está cuantificada ni se reporta en el mismo, por lo que se requieren acciones constantes para su actualización acordes con el caso de estudio que se desee modelar (Hao et al. 2002, Streets et al. 2003, de Foy et al. 2006, Sowden et al. 2008, Keenan et al. 2009, Li et al. 2010, Ying et al. 2012, Trejo 2017).

Teniendo en cuenta lo anterior, se llevó a cabo un proceso de actualización del IE a partir de una metodología descrita en la **figura 5**, la cual consiste en emplear el IE original (en este caso INEM-2013)

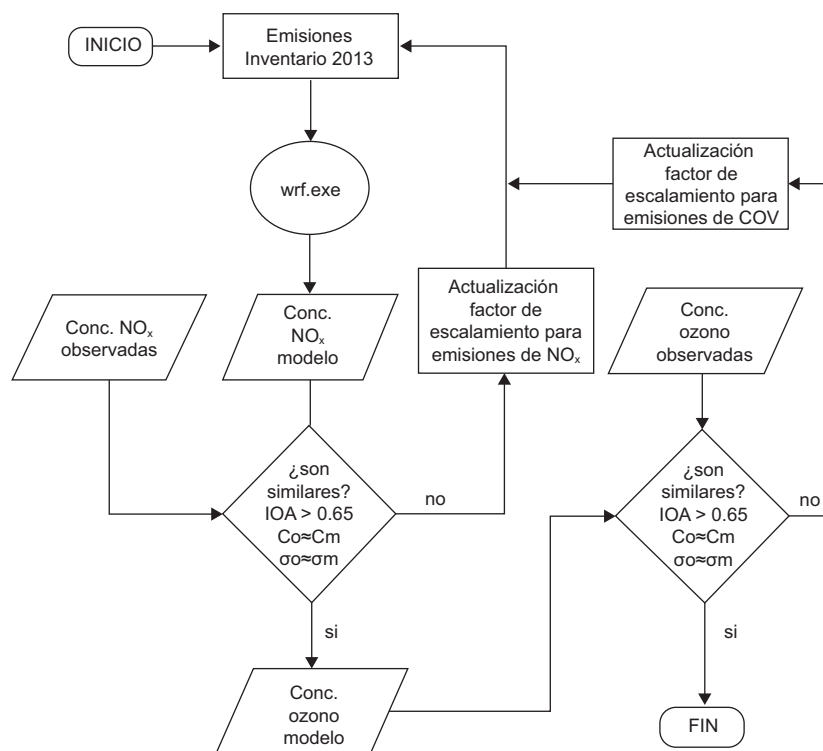


Fig. 5. Metodología de ajuste de emisiones en el INEM-2013 mediante modelación con WRF-Chem para la obtención de concentraciones de O₃ similares a las observadas.

para modelar la calidad del aire y evaluar los resultados de las concentraciones obtenidas respecto a las observaciones, inicialmente para NO_x. Cuando las métricas estadísticas muestren valores dentro del rango de aceptable se procede a comparar los resultados para el caso del O₃, con el objetivo de escalar las emisiones de COV en el IE (y las de NO_x, si fuera necesario) hasta que las métricas indiquen resultados aceptables.

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

Este primer factor de escalamiento se continúa actualizando mediante la metodología descrita en la **figura 5** hasta obtener un conjunto definitivo de valores (**Cuadro IV**). Se observa, en general, que para las fuentes de área se propone aumentar 2.6 veces las emisiones de CO y 1.25 veces las de SO₂, así como reducir entre el 80 y el 90 % las emisiones de NO y NO₂. Para las fuentes móviles es necesario disminuir aproximadamente a la mitad las emisiones de CO y NO₂, así como en 15 y 90 % las de SO₂ y NO, respectivamente. En el caso de las fuentes puntuales, los factores de escalamiento indican que

CUADRO IV. FACTORES DE ESCALAMIENTO OBTENIDOS POR CONTAMINANTE Y TIPO DE FUENTE.

Contaminante	Área	Móvil	Puntual
NO	0.18	0.10	1.20
NO ₂	0.10	0.53	0.40
CO	2.60	0.50	0.50
SO ₂	1.25	0.85	0.40
COV	2.50	2.50	2.50

COV: contaminantes orgánicos volátiles.

es preciso aumentar 1.2 veces las emisiones de NO y bajar entre 40 y 50 % las de NO₂, CO y SO₂. Para todos los casos, los COV se deben incrementar por un factor de 2.5.

La aplicación de esta metodología permite obtener una BDE actualizada y útil para modelación de la calidad del aire en el área de estudio. Se estima que la calibración es eficiente, ya que los factores de escalamiento determinados a partir de las simulaciones realizadas para el caso de estudio de 2017 fueron útiles para mejorar los resultados en el caso de 2016, es decir, en diferentes periodos de tiempo y condiciones atmosféricas se obtuvo un desempeño del modelo considerablemente superior (los resultados de ambos casos se presentan en secciones posteriores). Es importante aclarar que el uso de estos factores de escalamiento para actualizar el INEM-2013 permite alcanzar resultados más próximos a los medidos respecto al original, pero a fin de obtener resultados con mayor correlación podrían variar de acuerdo con la temporada del año a modelar, la calidad de los datos meteorológicos y las modificaciones que se realicen

a los datos del IE (objetivo de otra investigación en curso).

En la **figura 6** se muestran, a manera de ejemplo, las distribuciones espaciales de las emisiones de CO y NO obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado para el 15 de mayo de 2017 a las 03:00 y a las 18:00 horas, momentos del día en que se registran, como promedio, los valores mínimos y máximos de estas variables, debido principalmente al aumento o disminución del tráfico vehicular (Zhang et al. 2009). Las emisiones más elevadas de ambos contaminantes se observan hacia la ZMVM, en el horario de la tarde.

A modo de complemento, se presenta en la **figura 7** la serie de tiempo de emisiones de CO y NO entre el 15 y el 21 de mayo de 2017, para un sitio dentro del dominio, perteneciente a la ZMVM. Se observan comportamientos característicos de las emisiones de ambos contaminantes según las horas del día (Zhang et al. 2009).

Las emisiones biogénicas se obtuvieron del modelo Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature (MEGAN2; Guenther et al., 1994, 2006).

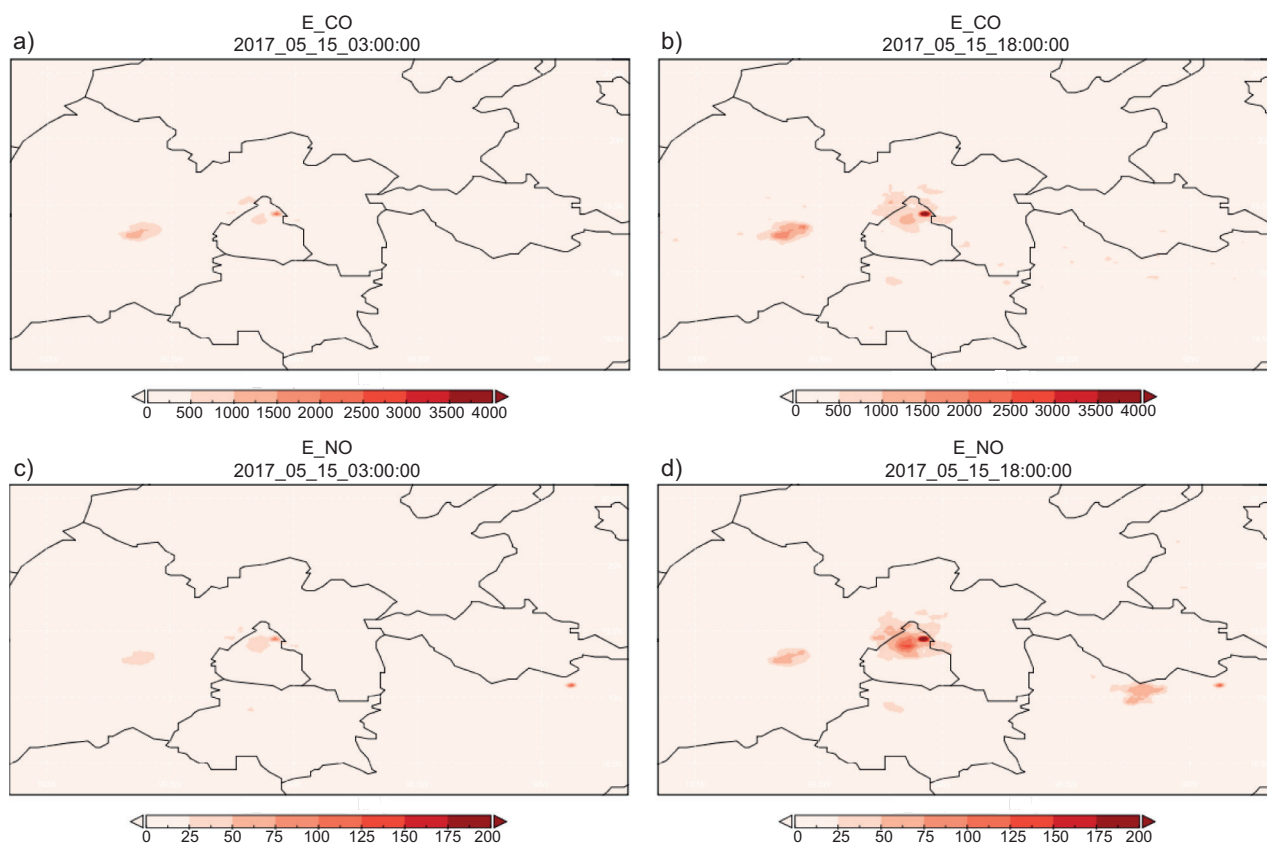


Fig. 6. Distribución espacial de las emisiones de (a y b) CO y (c y d) NO obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (15 de mayo de 2017, 03:00 y 18:00 horas).

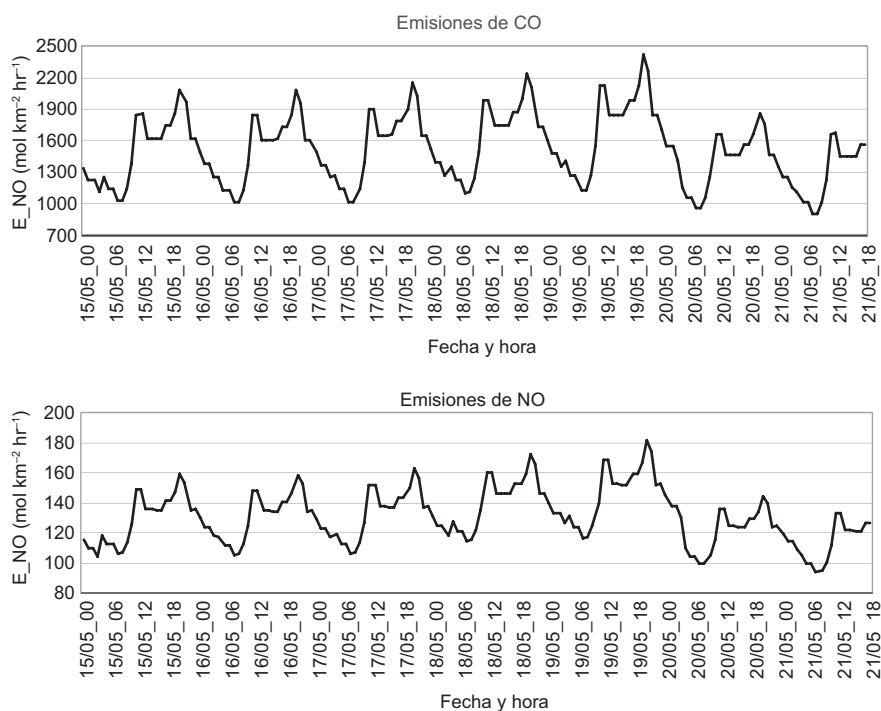


Fig. 7. Series de tiempo de las emisiones de (a) CO y (b) NO obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (15 al 21 de mayo de 2017) para un sitio de la ZMVM.

Métricas estadísticas

Para evaluar el desempeño del WRF-Chem se compararon los valores obtenidos en las simulaciones con mediciones de estaciones de la RAMA disponibles en los periodos de tiempo seleccionados, siempre que hubieran registrado el 75 % de las observaciones. De éstas se seleccionaron aquellas que tuvieran el 100 % de los valores en cada caso, para que sirvieran como muestra de los análisis estadísticos, quedando las estaciones CAM (Camarones), HGM (Hospital General de México), IZT (Iztacalco), MER (Merced), PED (Pedregal), SFE (Santa Fe), SJA (San Juan de Aragón) y TLA (Tlalnepantla) para el caso de 2017 y CAM, HGM, MER y TLA para 2016. La **figura 8** muestra su ubicación en el área de estudio.

Los resultados se analizaron con el Model Evaluation Tools (MET) versión 5.0, empleando la metodología de verificación celda-punto (Pielke 1984), en la cual se emparejan los valores simulados en las celdas del dominio correspondientes a la ubicación de las estaciones con los datos horarios de los contaminantes medidos. Luego se calcularon algunas métricas estadísticas (**Cuadro V**) muy utilizadas para evaluar cuantitativamente el desempeño del modelo y su error respecto a las observaciones. Lo más favorable sería que la media de los valores modelados (\bar{C}_m) se aproximara a la de los valores observados (\bar{C}_o), igual que sus

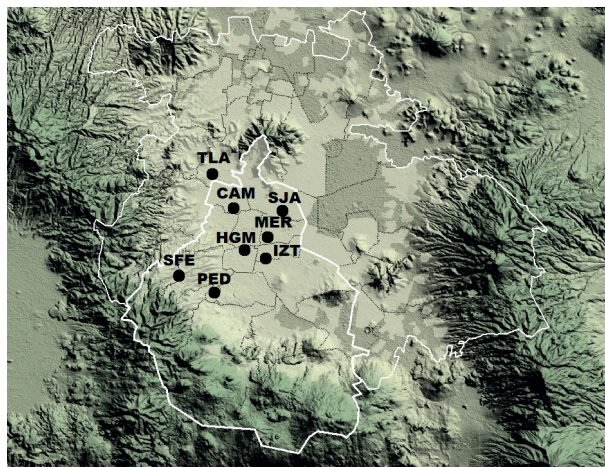


Fig. 8. Distribución de las estaciones de la RAMA consideradas en el área de estudio.

desviaciones estándar σ_o (y σ_m); que el sesgo medio (MB), el error medio (ME) y la raíz del error cuadrático medio (RMSE) muestren valores cercanos a 0, en tanto que el sesgo medio normalizado (NMB) y el error medio normalizado (NME) sean cercanos a 0 %; y que el coeficiente de correlación (ρ) y el índice de concordancia (IOA) presenten valores próximos a 1 (Pielke 1984, Willmott 1981, Willmott et al. 1985).

CUADRO V. DEFINICIÓN DE LAS MÉTRICAS ESTADÍSTICAS EMPLEADAS PARA EVALUAR EL DESEMPEÑO DEL MODELO WRF-CHEM.

Métricas	Definición
Media de los valores observados ($\overline{C_o}$)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_o^i$
Media de los valores modelados ($\overline{C_m}$)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_m^i$
Desviación estándar de los valores observados (σ_o)	$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_o^i - \overline{C_o})^2}$
Desviación estándar de los valores modelados (σ_m)	$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - \overline{C_m})^2}$
Sesgo medio (MB)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - C_o^i)$
Error medio (ME)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_m^i - C_o^i $
Sesgo medio normalizado (NMB, %)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(C_m^i - C_o^i)}{C_o^i}$
Error medio normalizado (NME, %)	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{ C_m^i - C_o^i }{C_o^i}$
Raíz del error cuadrático medio (RMSE)	$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - C_o^i)^2}$
Coeficiente de correlación (ρ)	$\frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - \overline{C_m})(C_o^i - \overline{C_o})}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_m^i - \overline{C_m})^2} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_o^i - \overline{C_o})^2}}$
Índice de concordancia (IOA)	$1 - \frac{\sum_{i=1}^N (C_m^i - C_o^i)^2}{\sum_{i=1}^N (C_m^i - \overline{C_m} + C_o^i - \overline{C_o})^2}$

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

Las variables meteorológicas analizadas en este trabajo son: temperatura superficial (T_2), humedad relativa (HR) y velocidad del viento (VV); en tanto que los contaminantes son: NO, NO₂, CO, SO₂, con especial énfasis en O₃, principal causante de episodios de alta contaminación en el área de estudio.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Desempeño del modelo WRF-Chem empleando el inventario de emisiones original

A continuación se presentan los resultados obtenidos de la modelación con WRF-Chem en el periodo

del 15 de mayo de 2017 a las 00:00 horas hasta el 21 de mayo de 2017 a las 18:00 horas, a partir de la BDE inicial con la cual se contaba para las simulaciones, obtenida del INEM-2013.

En el **cuadro VI** aparecen valores de las métricas estadísticas calculadas para las variables meteorológicas y químicas consideradas, siendo el valor mostrado en cada caso el promedio del conjunto de todas las estaciones disponibles. Se aprecia que para el caso de T_2 , HR y VV, los resultados son, en general, similares a los observados, sobre todo para T_2 , cuyos valores de IOA y ρ son superiores a 0.90, mientras que para HR y VV sobrepasan la aceptable cifra de 0.60. El modelo tiende a subestimar las ob-

CUADRO VI. MÉTRICAS ESTADÍSTICAS OBTENIDAS DE LA MODELACIÓN PARA LAS VARIABLES METEOROLÓGICAS Y CONTAMINANTES ANALIZADOS (15 AL 21 DE MAYO DE 2017) (INEM-2013 ORIGINAL).

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

\overline{C}_o : media de los valores observados, \overline{C}_m : media de los valores modelados, σ_o : desviación estándar de los valores observados, σ_m : desviación estándar de los valores modelados, MB: sesgo medio, NMB: sesgo medio normalizado, ρ : coeficiente de correlación, IOA: índice de concordancia, T₂: temperatura superficial; HR: humedad relativa; VV: velocidad del viento.

servaciones de los parámetros meteorológicos, sobre todo para HR, cuyo MB es de -12.96 y su NMB de -18.45 %. Tanto RMSE como ME para T₂ y VV concuerdan con las escalas de las variables. Sin embargo, para los contaminantes analizados, el desempeño del modelo es muy deficiente. Con excepción del O₃ (IOA = 0.54 y ρ = 0.54, ambos por debajo de lo aceptable), en el resto de las variables IOA y ρ presentan valores inferiores a 0.45, llegando a cifras mínimas respectivas de 0.08 y 0.16 para NO₂. Además, los resultados de las simulaciones muestran una sobre estimación en la concentraciones de NO₂ y NO, lo que es evidente por los valores elevados de MB, NMB y NME; estos últimos (NME) sobrepasan el 700 % para NO₂. En el caso del CO, el modelo subestima las observaciones, dado por MB = -81.76 y consolidado por NMB = -14.12 %. Las cifras muy altas de RMSE y ME para NO₂, NO

y CO indican igualmente que el error del modelo respecto a las observaciones es considerable. Por su parte, los valores de los estadísticos para SO₂, con RMSE = 8.66, ME = 5.19, IOA = 0.27 y ρ = 0.21, están fuera de lo aceptable dada la escala de esta variable.

En las **figuras 9, 10 y 11** se muestran, a modo de ejemplo para el caso de O₃, las series temporales de las concentraciones horarias para todo el conjunto de estaciones de la RAMA consideradas y sus respectivas simulaciones numéricas (**Fig. 9**), las series temporales de las concentraciones horarias máximas y medias (**Fig. 10**) y el diagrama de dispersión para todas las concentraciones horarias (**Fig. 11**). Se puede apreciar que el modelo WRF-Chem no tiene un buen desempeño en la descripción del comportamiento de esta variable química en el área de estudio; es decir, aunque simula el ciclo diario de O₃, no representa

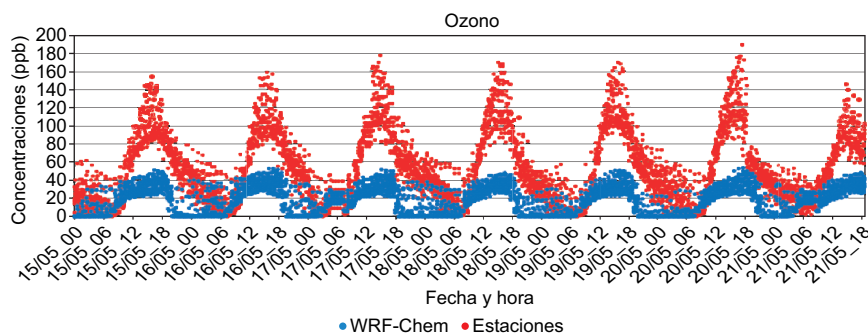


Fig. 9. Series de tiempo de todas las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 original) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

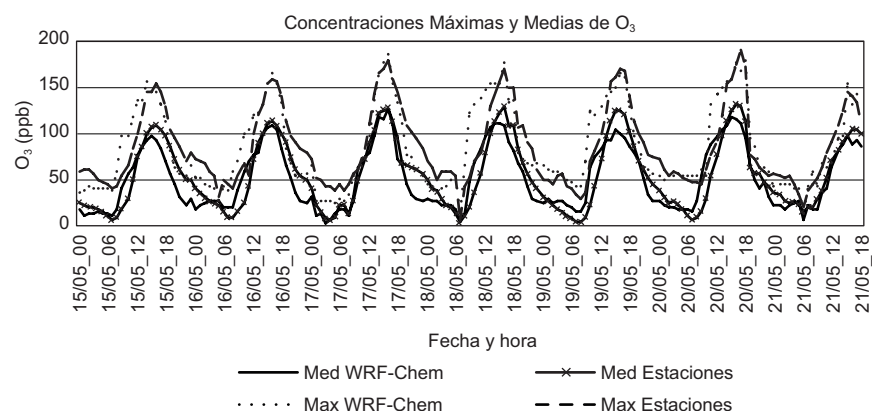


Fig. 10. Series de tiempo de las concentraciones máximas y medias horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 original) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

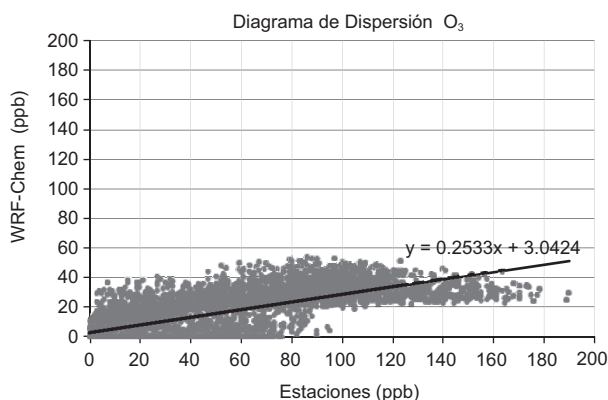


Fig. 11. Diagrama de dispersión para las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 original) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

adecuadamente su distribución temporal en cuanto a sus valores puntuales y medios, ya que subestimando considerablemente las observaciones —sobre todo en sus picos máximos—, mostrando cifras que no sobrepasan las concentraciones de fondo.

Los resultados anteriores confirman que el INEM-2013 original no es adecuado para elaborar una BDE útil para la modelación de la calidad del aire en el área de estudio. Debe destacarse que la calidad del IE es determinante para simular las concentraciones de los contaminantes atmosféricos con mejor precisión respecto a las observaciones y en menor medida influye también en el comportamiento de las variables meteorológicas, ya que el modelo WRF-Chem emplea un mecanismo que considera la interacción aerosoles-radiación (**Cuadro III**) para incluir el efecto de las emisiones en la meteorología; es decir,

las emisiones de COV generan aerosoles orgánicos secundarios que influyen en la radiación solar que llega a la superficie, modificando la temperatura superficial y con ello otras variables meteorológicas calculadas por el modelo (Forkel et al. 2012).

Desempeño del modelo WRF-Chem empleando el inventario de emisiones actualizado

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

En el **cuadro VII** se muestran los valores de las métricas estadísticas calculadas para las variables meteorológicas y contaminantes seleccionados, apreciándose que las mismas indican una mejora cuantitativa respecto a la simulación inicial. En todos los casos los valores medios modelados son muy cercanos a los observados, con un rango de diferencia máxima del 15 % para las variables meteorológicas y el O₃, y algo superiores para el resto de los contaminantes, pero siempre aceptables. El modelo continúa subestimando ligeramente las observaciones en el caso de T₂, VV y O₃ y hasta en un 14.62 % para el caso de HR (cifra que aún se considera buena), y sobrestima el resto de las variables, sobre todo CO, que presenta un MB = 61.35, en tanto que NO₂ y NO tienen NMB y NME superiores a 25 %, MB de 13.24 y 18.06, respectivamente, así como ME > 25.00, lo que las convierte en las variables con resultados más discretos, pero dentro del intervalo aceptable con valores menores al 30 %. Los coeficientes IOA y ρ son mayores a 0.70 para todas las variables

CUADRO VII. MÉTRICAS ESTADÍSTICAS OBTENIDAS DE LA MODELACIÓN PARA LAS VARIABLES METEOROLÓGICAS Y CONTAMINANTES ANALIZADOS (15 AL 21 DE MAYO DE 2017) (INEM-2013 ACTUALIZADO)..

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

\overline{C}_o : media de los valores observados, \overline{C}_m : media de los valores modelados, σ_o : desviación estándar de los valores observados, σ_m : desviación estándar de los valores modelados, MB: sesgo medio, NMB: sesgo medio normalizado, ρ : coeficiente de correlación, IOA: índice de concordancia, T₂: temperatura superficial; HR: humedad relativa; VV: velocidad del viento.

meteorológicas, llegando a idénticos con 0.94 en el caso de T₂. Sus valores de RMSE, son muy bajos, casi insignificantes para T₂ y VV, al igual que SO₂ entre los contaminantes; éstos, en general, presentan valores de IOA y ρ superiores a 0.65, destacándose el O₃ con coeficientes respectivos que ascienden a 0.88 y 0.86. En ninguno de los casos la métrica NME supera el 30 %, por lo que se considera que el modelo tiene muy buen rendimiento y reduce los errores respecto a las observaciones.

En la **figura 12** se muestran las series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ de todo el conjunto de estaciones consideradas con sus pares simulados correspondientes, mientras que en las **figuras 13 y 14** aparecen, respectivamente, para las concentraciones medias y máximas horarias. En ambas se observa

que el modelo describe la distribución temporal de la variable en términos de su ciclo diario —ampliamente estudiado en investigaciones anteriores (Tie et al. 2007, Stephens et al. 2008) y tiene la capacidad de simular tanto los valores medios como los picos diarios de concentraciones de O₃ en correspondencia con las observaciones, lo cual se confirma tanto en el diagrama de dispersión de la **figura 15** como en la **figura 16**. En esta última se muestra un resumen del porcentaje de casos observados y modelados en cada uno de los diferentes rangos definidos para las concentraciones horarias de O₃.

Para analizar los resultados de manera puntual, en la **figura 17** se muestran las series de tiempo de las concentraciones de O₃ modeladas y observadas en algunas estaciones seleccionadas de la RAMA,

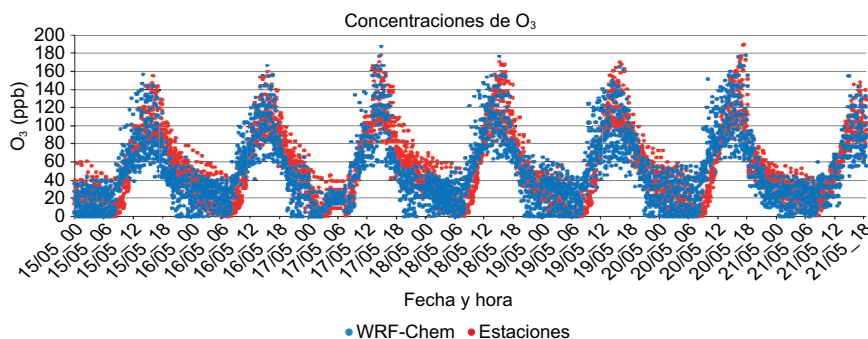


Fig. 12. Series de tiempo de todas las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

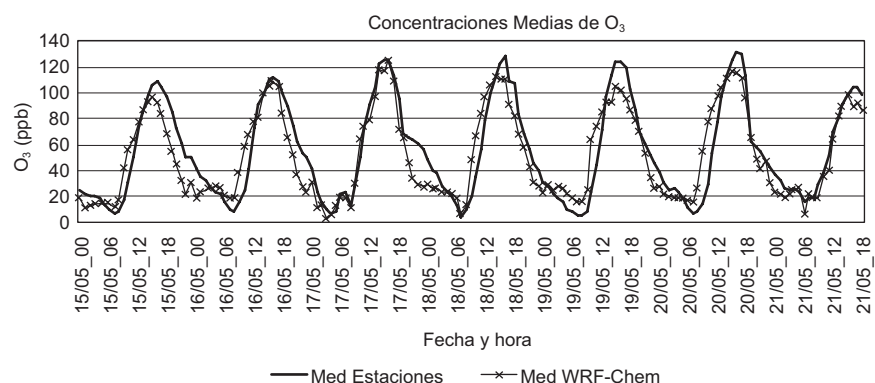


Fig. 13. Series de tiempo de las concentraciones medias horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

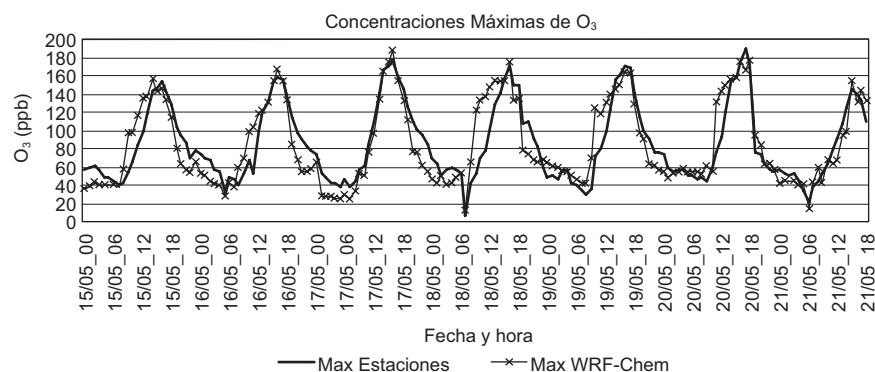


Fig. 14. Series de tiempo de las concentraciones máximas horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

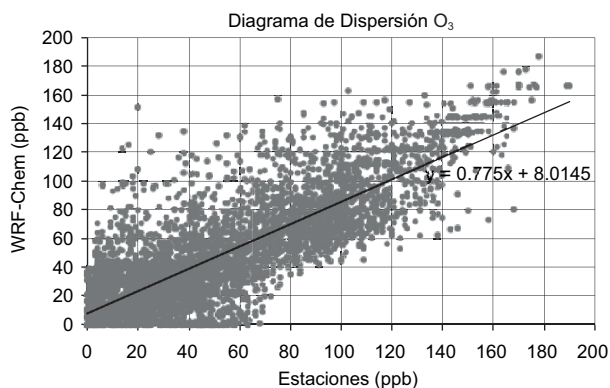


Fig. 15. Diagrama de dispersión para las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

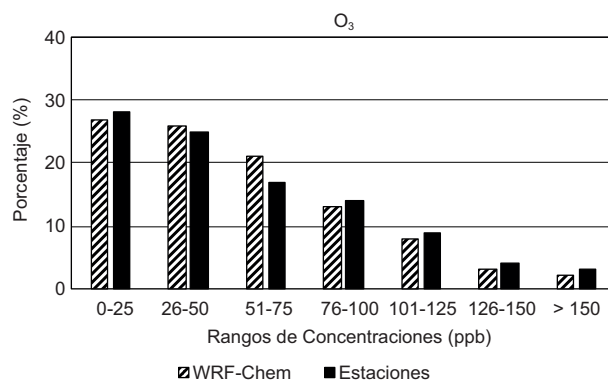


Fig. 16. Porcentaje de casos dentro de los rangos definidos de concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

mientras que en el **cuadro VIII** se presentan los valores de los estadísticos calculados. Lo más importante a señalar es que estas ocho estaciones muestran cifras de IOA y ρ siempre superiores a 0.88 y muy cercanas

a 1, con valores medios simulados que fluctúan entre 4 y 14 % de las observaciones. El modelo siempre tiende a subestimar las mediciones, sobre todo los picos máximos de las concentraciones, que en el caso

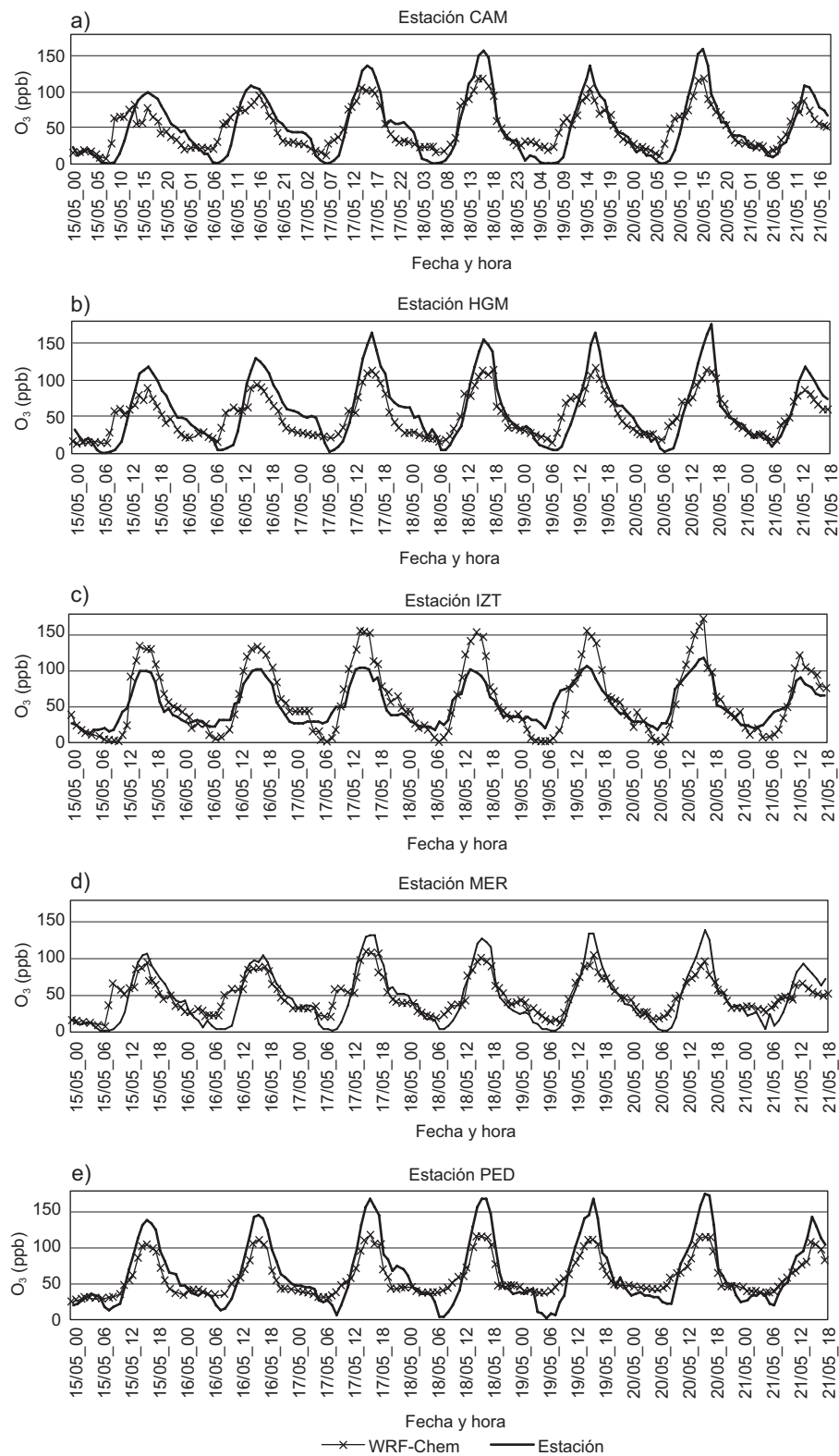


Fig. 17. Series de tiempo de las concentraciones horarias de O_3 modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

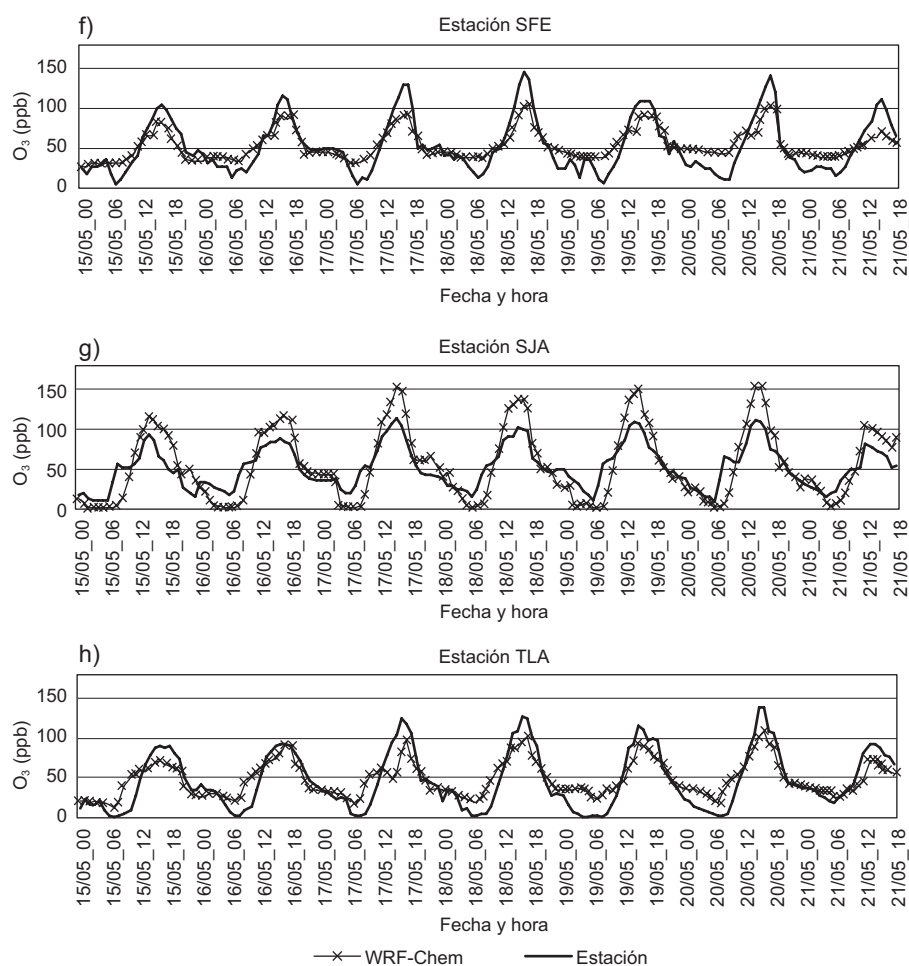


Fig. 17. Series de tiempo de las concentraciones horarias de O_3 modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (15 al 21 de mayo de 2017).

CUADRO VIII. MÉTRICAS ESTADÍSTICAS OBTENIDAS DE LA MODELACIÓN DE O_3 PARA ESTACIONES SELECCIONADAS DE LA RAMA (15 AL 21 DE MAYO DE 2017) (INEM-2013 ACTUALIZADO).

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

media de los valores observados, media de los valores modelados, desviación estándar de los valores observados, desviación estándar de los valores modelados, MB: sesgo medio, NMB: sesgo medio normalizado, ρ : coeficiente de correlación, IOA: índice de concordancia, CAM: Camarones, HGM: Hospital General de México, IZT: Iztacalco, MER: Merced, PED: Pedregal, SFE: Santa Fe, SJA: San Juan de Aragón, TLA: Tlalnepantla.

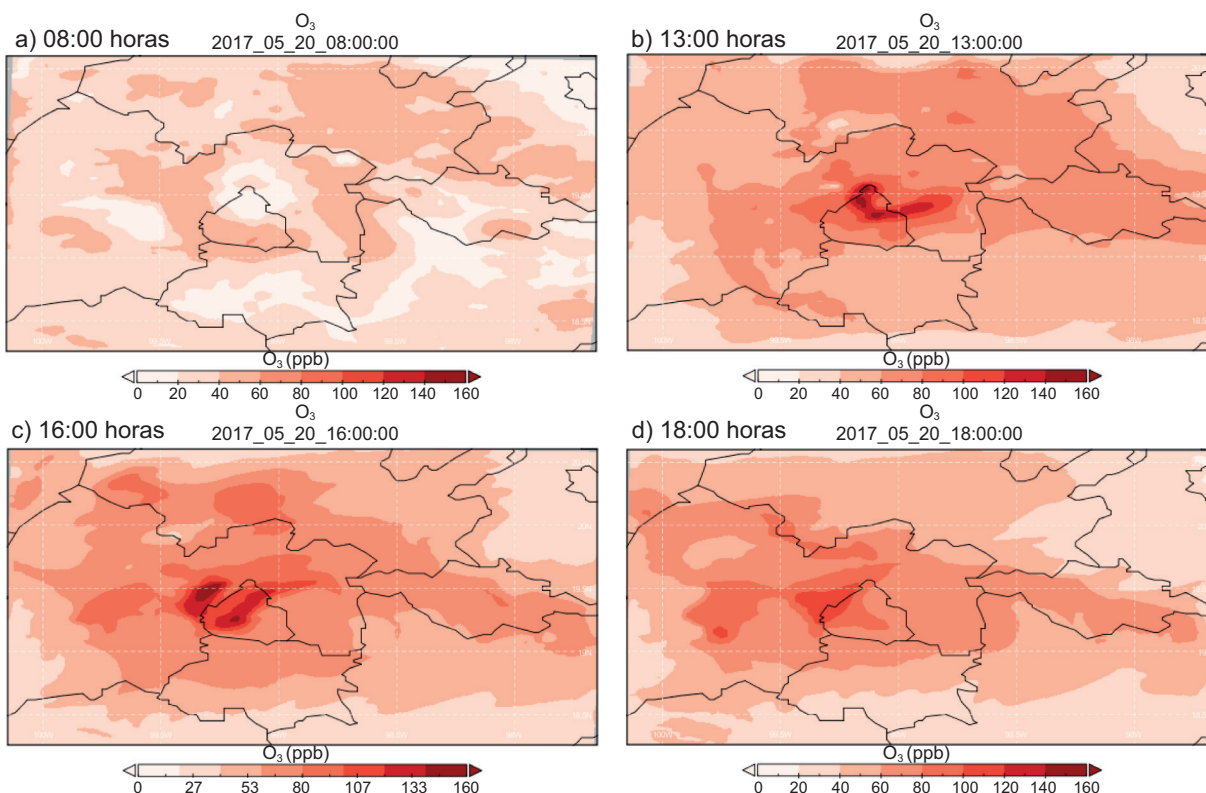


Fig. 18. Distribución espacial de las concentraciones de O_3 (en ppb) obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (20 de mayo de 2017). (a) 08:00, (b) 13:00, (c) 16:00 y (d) 18:00 horas.

del MB varían de -0.35 (SFE) a -8.15 (HGM). El NMB se encuentra en el rango de 0 a -1% , en tanto que el NME siempre es inferior a 9% . Por su parte, el RMSE fluctúa entre 18.43 (SFE) y 23.83 (HGM). En general, la estación SFE muestra los mejores valores de las métricas calculadas mientras que HGM los menos favorables.

Finalmente, se analiza el desempeño del modelo WRF-Chem en la simulación del comportamiento espacial de los contaminantes. En la **figura 18** se muestra, a modo de ejemplo, la distribución de las concentraciones medias de O_3 simuladas en el dominio de modelación a partir del INEM-2013 actualizado, para diferentes horarios del día 20 de mayo de 2017. Los resultados confirman la variación temporal de este contaminante, cuyas concentraciones medias aumentan a lo largo del día. Se comprueba que los picos máximos aparecen en zonas pertenecientes a la ZMVM o muy próximas a ésta, lo cual evidencia que es la más contaminada por O_3 en el área de estudio.

Se aprecia claramente que los resultados de las simulaciones con WRF-Chem a partir del INEM-2013 actualizado son mucho más cercanos a las observaciones y con métricas estadísticas considerablemente

superiores a las obtenidas para el caso original. La distribución temporal de las variables modeladas es muy similar a la observada en las estaciones disponibles, incluyendo valores medios y picos máximos con diferencias muy pequeñas. Además, el modelo es razonablemente preciso en la simulación del comportamiento del O_3 , variable que tiene la mayor importancia en los episodios de alta contaminación ambiental en el centro de México, específicamente en la ZMVM.

Validación de los factores de escalamiento utilizados para la actualización del inventario

Con el objetivo de validar que los factores de escalamiento obtenidos sean adecuados para modificar el INEM-2013, y que la BDE derivada del mismo se pueda emplear en MCA en el centro de México en otros periodos de tiempo, se realiza una simulación de control para los días 14 al 17 de marzo de 2016, fechas en que se activó el PCAA por O_3 en la ZMVM.

En el **cuadro IX** se muestran las métricas estadísticas obtenidas en las simulaciones con el INEM-2013 actualizado para las variables meteorológicas y los contaminantes analizados, mientras que en la **figura 19** aparece una comparación entre los valores

CUADRO IX. MÉTRICAS ESTADÍSTICAS OBTENIDAS DE LA MODELACIÓN PARA LAS VARIABLES METEOROLÓGICAS Y CONTAMINANTES ANALIZADOS (14 AL 17 DE MARZO DE 2016) (INEM-2013 ACTUALIZADO).

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

$\overline{C_o}$: media de los valores observados, $\overline{C_m}$: media de los valores modelados, σ_o : desviación estándar de los valores observados, σ_m : desviación estándar de los valores modelados, MB: sesgo medio, NMB: sesgo medio normalizado, ρ : coeficiente de correlación, IOA: índice de concordancia, T₂: temperatura superficial; HR: humedad relativa; VV: velocidad del viento.

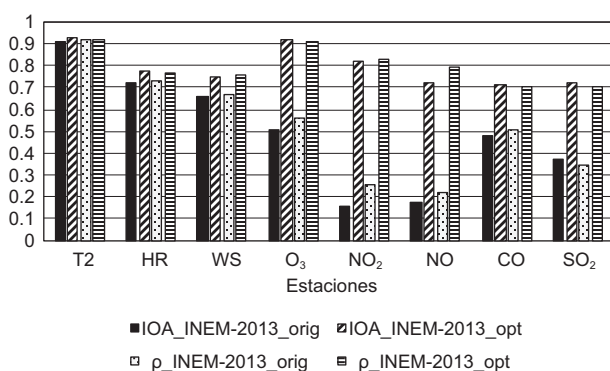


Fig. 19. Comparación de los valores de IOA y ρ calculados para las distintas variables analizadas en las modelaciones a partir del INEM-2013 actualizado y original (14 al 17 de marzo de 2016).

de IOA y ρ calculados para las distintas variables analizadas en las modelaciones con el IE original y actualizado. Los resultados muestran de forma general una correlación alta y los valores de IOA y ρ son muy superiores en las simulaciones con INEM-2013 actualizado, principalmente para los contaminantes atmosféricos. Se destaca en este sentido el O₃, cuyos valores superan 0.90, mientras que en el caso de NO y NO₂, inicialmente se encontraban por debajo de 0.30 y con la actualización sobrepasan 0.78. Las variables meteorológicas muestran ligeras variaciones, pero siempre positivas, ubicándose las cifras para HR y VV entre 0.70 y 0.80, mientras que para T₂, IOA = 0.93 y ρ = 0.92 debido a que el modelo considera la interacción entre la radiación y aerosoles secundarios generados por reacciones atmosféricas.

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

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

En la **figura 20** se muestra la serie de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ de todo el conjunto de estaciones disponibles con sus pares simulados a partir del INEM-2013 actualizado. Se confirma que el WRF-Chem tiene la capacidad de describir el ciclo diario del O₃, sobre todo en los valores medios, lo cual se puede comprobar en el diagrama de dispersión

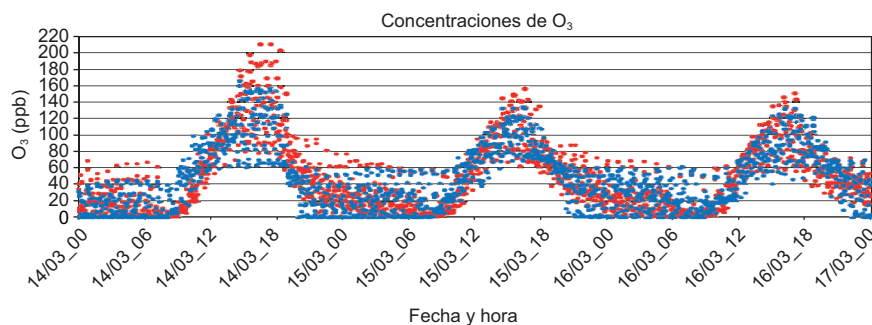


Fig. 20. Series de tiempo de todas las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016).

de la **figura 21**. Sin embargo, en cuanto a los picos de concentraciones máximas, el modelo los detecta en el horario adecuado, pero se aprecian algunas diferencias respecto a los valores observados, los cuales

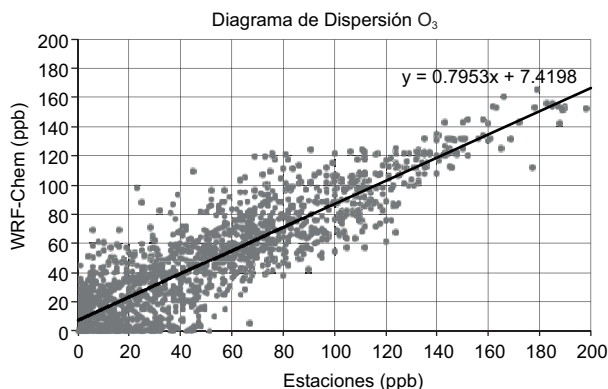


Fig. 21. Diagrama de dispersión de las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en las estaciones disponibles de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016).

se subestiman, sobre todo para el día 14 cuando los máximos sobrepasaron los 175 e incluso los 200 ppb, mientras que las simulaciones apenas reflejaron cifras ligeramente superiores a 150 ppb. Esta situación puede deberse a la influencia en las concentraciones de O₃ del transporte de contaminantes de regiones cercanas hacia el área de estudio, pero que no puede cuantificarse en la modelación porque esas emisiones no están consideradas dentro del dominio de la BDE que se obtiene del INEM-2013.

Las series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ modeladas y observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA se presentan en la **figura 22**, mientras que en el **cuadro X** aparecen los valores de las métricas estadísticas calculadas. Las cifras de IOA y ρ indican alta correlación en todos los casos, siempre superior a 0.89. Los valores medios simulados y observados difieren en un 10 % para CAM y en alrededor de un 20 % para el resto de las estaciones. El modelo tiende a subestimar las mediciones, sobre todo con picos máximos en el MB, el cual fluctúa entre -3.73 (CAM) y -11.79 (HGM), en tanto que

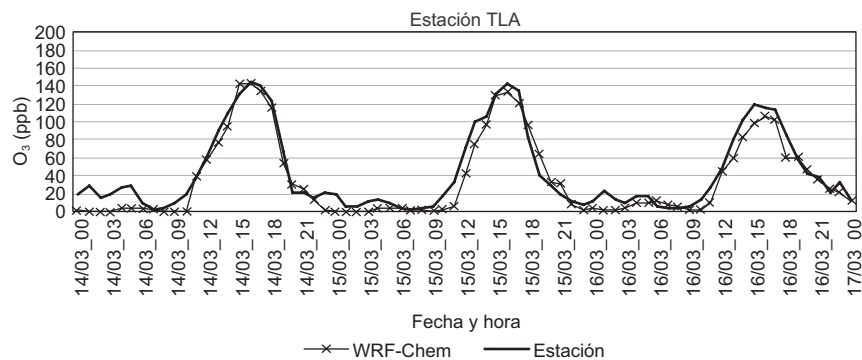


Fig. 22. Series de tiempo de las concentraciones horarias de O₃ modeladas (INEM-2013 actualizado) y observadas en estaciones seleccionadas de la RAMA (14 al 17 de marzo de 2016).

CUADRO X. MÉTRICAS ESTADÍSTICAS OBTENIDAS DE LA MODELACIÓN DE O₃ PARA ESTACIONES SELECCIONADAS DE LA RAMA (14 AL 17 DE MARZO DE 2017) (INEM-2013 ACTUALIZADO).

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

\overline{C}_o : media de los valores observados, \overline{C}_m : media de los valores modelados, σ_o : desviación estándar de los valores observados, σ_m : desviación estándar de los valores modelados, MB: sesgo medio, NMB: sesgo medio normalizado, ρ : coeficiente de correlación, IOA: índice de concordancia, CAM: Camarones, HGM: Hospital General de México, MER: Merced, TLA: Tlalnepantla

el NMB lo hace en el rango de 0 a 1.5 % y el NME permanece siempre por debajo de 8 %. Los valores de ME y RMSE son aceptables para la escala de las variables. Para la estación HGM, que presenta los resultados más discretos en los estadísticos mostrados, el WRF-Chem subestima en más de 40 ppb el valor máximo de concentración de O₃ alcanzado el día 14.

Finalmente, en la **figura 23** se muestra la distribución de las concentraciones medias de O₃ simuladas en el dominio de modelación a partir del INEM-2013 actualizado, para diferentes horarios del 15 de marzo de 2016. Se manifiesta la capacidad del WRF-Chem para modelar el comportamiento espacial de la variable, con máximos observados en zonas ubicadas dentro de la ZMVM o muy próximas a ésta, y una descripción adecuada de su ciclo diario con aumento de las concentraciones en horas de la tarde.

CONCLUSIONES

En este estudio se aplica el modelo DiETE al INEM-2013 para obtener una BDE útil para la modelación de la calidad del aire en el centro de México.

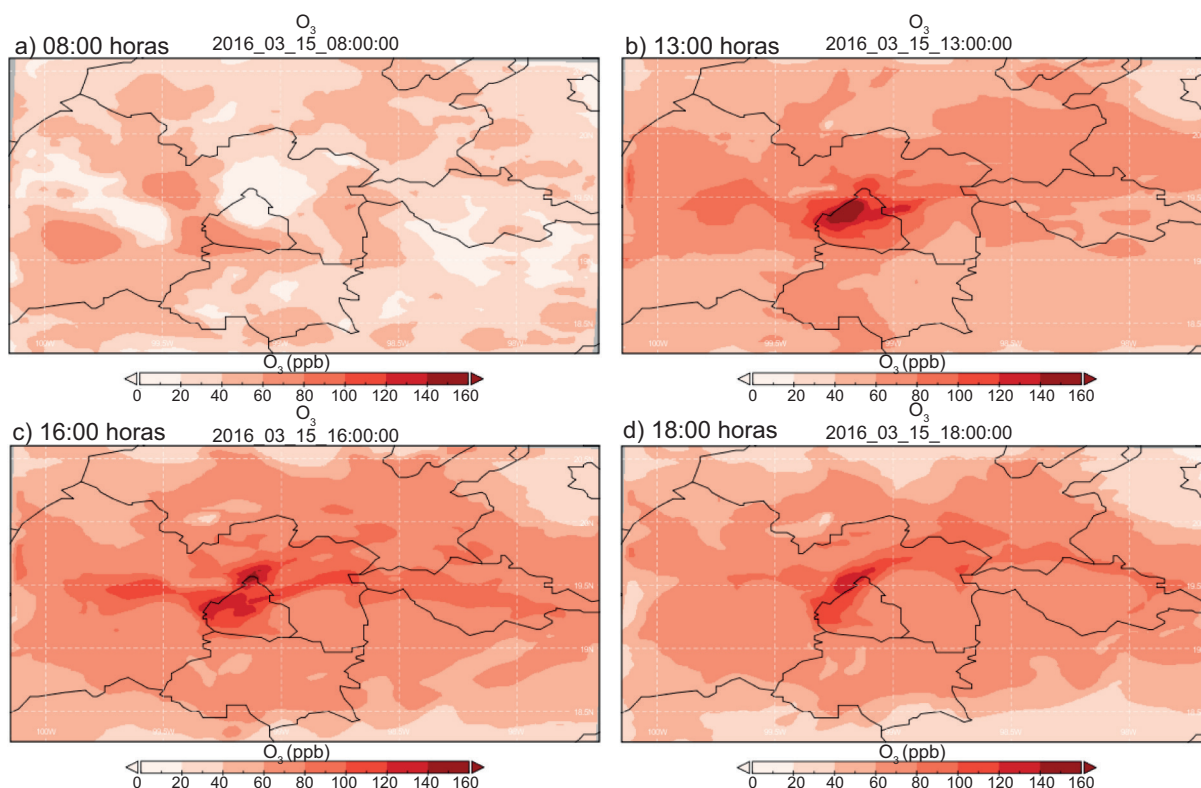


Fig. 23. Distribución espacial de las concentraciones de O₃ (en ppb) obtenidas a partir del INEM-2013 actualizado (15 de marzo de 2016). (a) 08:00, (b) 13:00, (c) 16:00 y (d) 18:00 horas.

Se realizan simulaciones numéricas con el modelo WRF-Chem en periodos de tiempo seleccionados, teniendo en cuenta la activación del PCAA en la ZMVM para 2016 y 2017.

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

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

Se evalúan nuevamente las salidas del modelo y se comprueba que el empleo del INEM-2013 actualizado produce una mejoría considerable en el desempeño del WRF-Chem, según los valores de los estadísticos considerados. Las cifras de IOA y son siempre superiores a 0.65 para todos los contaminantes, llegando a 0.88 y 0.86, respectivamente, en el caso del O_3 , el más importante en el área de interés. Precisamente el O_3 presenta concentraciones similares a las observadas en cuanto a su distribución temporal (ciclo diario característico y valores medios y extremos consistentes con las mediciones) y en su comportamiento espacial (máximas concentraciones en puntos dentro de la ZMVM). Debe señalarse que el modelo mantiene la tendencia a subestimar las observaciones de O_3 , aunque solo ligeramente, con un MB = -3.89 y NMB de sólo -0.34 %.

Los factores de escalamiento obtenidos son validados mediante la evaluación de los resultados de las simulaciones numéricas realizadas para el caso de estudio de 2016, los cuales son nuevamente superiores al emplearse el INEM-2013 actualizado, incluso respecto al primer periodo. Los valores de IOA y ρ sobrepasan 0.70 para todos los contaminantes, mejorando considerablemente los registros iniciales

para NO_2 y NO. En el caso del O_3 , ambas métricas superan 0.90 y se mantiene el buen desempeño del WRF-Chem en la simulación de sus características espacio-temporales, aunque persiste en subestimar las observaciones ligeramente, con MB = -3.97 y NMB = -0.48 %, comportamiento que se acrecienta en los picos máximos, con diferencias que superan 40 ppb.

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

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

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

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

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca núm. 627876 (CVU) otorgada a José Alejandro Rodríguez Zas para realizar sus estudios de doctorado en Ciencias de la Tierra. Además, agradecen el tiempo de cómputo otorgado por la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) en la supercomputadora Miztli de la Dirección General de Cómputo y Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC) y en el clúster Ometéotl del Centro de ciencias de la Atmósfera (CCA).

REFERENCIAS

Arriaga-Colina J.L., West J.J., Sosa G., Escalona S.S., Orduñez R.M. y Cervantes A.D.M. (2004). Measurements of

- VOCs in Mexico City (1992-2001) and evaluation of VOCs and CO in the emissions inventory. *Atmos. Environ.* 38, 2523-2533. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.01.033>
- Borrego C., Monteiro A., Ferreira J., Miranda A.I., Costa A.M., Carvalho A.C. y Lopes M. (2008). Procedures for estimation of modeling uncertainty in air quality assessment. *Environ. Int.* 34, 613-620. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2007.12.005>
- Brown M. (1993). Deduction of emission of source gases using an objective inversion algorithm and a chemical transport model. *J. Geophys. Res.* 98, 12639-12660. <https://doi.org/10.1029/93JD01003>
- CAME (2016). Se activa fase i de contingencia ambiental atmosférica por ozono en la Zona Metropolitana del Valle de México. Comunicado de prensa núm. 06/2016. Comisión Ambiental de la Megalópolis, Ciudad de México, 14 de marzo [en línea]. <https://www.gob.mx/comisionambiental/prensa/comunicado-de-prensa-26192?idiom=es>
- CARB (1997). Public meeting to consider approval and verification of the California Emissions Inventory. California Air Resources Board, Sacramento, California.
- Chang M.E., Hartley D.E., Cardelino C., Haas-Laursen D. y Chang W.L. (1997). On using inverse methods for resolving emissions with large spatial inhomogeneities. *J. Geophys. Res.* 102, 16023-16036. <https://doi.org/10.1029/97JD00964>
- Chang J.C. y Hanna S.R. (2004). Air quality model performance evaluation. *Meteorol. Atmos. Phys.* 87, 167-196. <https://doi.org/10.1007/s00703-003-0070-7>
- Chen F. y Dudhia J. (2001). Coupling an advanced land surface-hydrology model with the Penn State-NCAR MM5 modeling system. Part I: Model description and implementation. *Mon. Weather Rev.* 129, 569-585. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(2001\)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(2001)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2)
- De Foy B., Clappier A., Molina L.T. y Molina M.J. (2006). Distinct wind convergence patterns in the Mexico City basin due to the interaction of the gap winds with the synoptic flow. *Atmos. Chem. Phys.* 6, 1249-1265. <https://doi.org/10.5194/acp-6-1249-2006>
- Dudhia J. (1989). Numerical study of convection observed during the Winter Monsoon Experiment using a mesoscale two-dimensional model. *J. Atmos. Sci.* 46, 3077-3107. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1989\)046<3077:NSOCOD>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1989)046<3077:NSOCOD>2.0.CO;2)
- Elbern H., Strunk A., Schmidt H. y Talagrand O. (2007). Emission rate and chemical state estimation by 4-dimensional variational inversion. *Atmos. Chem. Phys.* 7, 3749-3769. <https://doi.org/10.5194/acp-7-3749-2007>
- Fast J.D., Gustafson W.I. Jr., Easter R.C., Zaveri R.A., Barnard J.C., Chapman E.G., Grell G.A. y Peckham S.E. (2006). Evolution of ozone, particulates, and aerosol direct radiative forcing in the vicinity of Houston using a fully coupled meteorology-chemistry-aerosol model. *J. Geophys. Res.* 111, D21305. <https://doi.org/10.1029/2005JD006721>
- Forkel R., Werhahn J., Hansen A.B., McKeen S., Peckham S., Grell G. y Suppan P. (2012). Effect of aerosol-radiation feedback on regional air quality – A case study with WRF/Chem. *Atmos. Environ.* 53, 202-211. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.10.009>
- Fujita E.M., Croes B.E., Bennett C.L., Lawson D.R., Lurmann F.W. y Main H.H. (1992). Comparison of emission inventory and ambient concentration ratios of CO, NMOG and NOx in California's South Coast Air Basin. *J. Air Waste Manage. Assoc.* 42 (3), 264-276. <https://doi.org/10.1080/10473289.1992.10466989>
- Funk T.H., Chinkin L.R., Roberts P.T., Saeger M., Mulligan S., Figueroa V.H.P. y Yarbrough J. (2001). Compilation and evaluation of a Paso del Norte emission inventory. *Sci. Total Environ.* 276, 135-151. [https://doi.org/10.1016/S0048-9697\(01\)00776-8](https://doi.org/10.1016/S0048-9697(01)00776-8)
- García-Reynoso J.A., Mar-Morales B.E. y Ruiz-Suárez L.G. (2018). Modelo de distribución espacial, temporal y de especiación del Inventario de Emisiones de México (año base 2008) para su uso en modelización de calidad del aire (DiETE). *Rev. Int. Contam. Ambie.* 34 (4), 635-649. <https://doi.org/10.20937/RICA.2018.34.04.07>
- Grell G.A., Peckham S.E., Schmitz R., McKeen S.A., Frost G., Skamarock W.C. y Eder B. (2005). Fully coupled "online" chemistry within the WRF model. *Atmos. Environ.* 39, 6957-6975. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.04.027>
- Goldberg D.E. (1989). Genetic algorithm in search, optimisation and machine learning. Addison-Wesley, Reading, MA, 415 pp.
- Guenther A., Zimmerman P. y Wildermuth M. (1994). Natural volatile organic compound emission rate estimates for U.S. Woodland landscapes. *Atmos. Environ.* 28, 1197-1210. [https://doi.org/10.1016/1352-2310\(94\)90297-6](https://doi.org/10.1016/1352-2310(94)90297-6)
- Guenther A., Karl T., Harley P., Wiedinmyer C., Palmer P.I. y Geron, C. (2006). Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature). *Atmos. Chem. Phys.* 6, 3181-3210. <https://doi.org/10.5194/acp-6-3181-2006>
- Guilliland A.B., Appel K.W., Pinder R.W. y Dennis R.L. (2006). Seasonal NH₃ emissions for the continental United States: inverse model estimation and evaluation. *Atmos. Environ.* 40, 4986-4998. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.12.066>

- Hakami A., Henze D.K., Seinfeld J.H., Chai T., Tang Y., Carmichael G.R. y Sandu A. (2005). Adjoint inverse modeling of black carbon during the Asian Pacific Regional Aerosol Characterization Experiment. *J. Geophys. Res.* 110, D14301. <https://doi.org/10.1029/2004JD005671>
- Hao J., Tian H. y Lu Y. (2002). Emission inventories of NO_x from commercial energy consumption in China, 1995-1998. *Environ. Sci. Technol.* 36, 552-560. <https://doi.org/10.1021/es015601k>
- Hernández J.O. (2006). Actualización del inventario de emisiones para el pronóstico de la calidad del aire en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México. Tesis de Licenciatura. Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México, México, 86 pp.
- Holland J.H. (1975). Adaptation in natural and artificial systems. The University of Michigan Press, Ann Arbor, MI, 183 pp.
- Hong S.Y., Dudhia J. y Chen S.H. (2004). A revised approach to ice microphysical processes for the bulk parameterization of clouds and precipitation. *Mon. Weather. Rev.* 132, 103-120. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(2004\)132<0103:ARATIM>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(2004)132<0103:ARATIM>2.0.CO;2)
- Hong S.Y., Noh Y. y Dudhia J. (2006). A new vertical diffusion package with an explicit treatment of entrainment processes. *Mon. Weather Rev.* 134, 2318-2341. <https://doi.org/10.1175/MWR3199.1>
- Huang C., Chen C.H., Li L., Cheng Z., Wang H.L., Huang H.Y., Streets D.G., Wang Y.J., Zhang G.F. y Chen Y.R. (2011). Emission inventory of anthropogenic air pollutants and VOC species in the Yangtze River Delta region, China. *Atmos. Chem. Phys.* 11 (9), 4105-4120. <https://doi.org/10.5194/acp-11-4105-2011>
- INECC (2017). Preparación de un inventario de emisiones para modelación. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Informe final. Ciudad de México, México, 35 pp. [en línea]. https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/310811/Informe_INECC_RP_A1-004_2017_Inventario_para_Modelaci_n_V3.pdf
- INECC (2018). Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero 1990-2015. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Resumen Informativo. Ciudad de México, México, 10 pp. [en línea]. <https://cambioclimatico.gob.mx/sexta-comunicacion/material/Inventario.pdf>
- IPCC (2000). Good practice guidance and uncertainty management in national greenhouse gas inventories. Panel Intergubernamental de Cambio Climático [en línea]. <http://www.ipcc-nggip.iges.or.jp/public/gp/english>
- Kain J.S. y Fritsch J.M. (1993). Convective parameterization for mesoscale models: the Kain-Fritsch scheme. En: The representation of cumulus convection in numerical models (Emanuel K.A. y Raymond D.J., Ed.). Amer. Meteor. Soc. 165-170. https://doi.org/10.1007/978-1-935704-13-3_16
- Kain J.S. (2004). The Kain-Fritsch convective parameterization: an update. *J. Appl. Meteorol.* 43, 170-181. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(2004\)0432.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(2004)0432.0.CO;2)
- Keenan T., Niinemets U., Sabate S., Gracia C. y Penuelas J. (2009). Process based inventory of isoprenoid emissions from European forests: Model comparisons, current knowledge and uncertainties. *Atmos. Chem. Phys.* 9 (12), 4053-4076. <https://doi.org/10.5194/acp-9-4053-2009>
- Kurokawa J., Yumimoto K., Uno I. y Ohara T. (2009). Adjoint inverse modeling of NO_x emissions over Eastern China using satellite observations of NO₂ vertical column densities. *Atmos. Environ.* 43 (11), 1878-1887. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.12.030>
- Li M.J., Chen D.S., Cheng S.Y., Wang F., Li Y., Zhou Y. y Lang J.L. (2010). Optimizing emission inventory for chemical transport models by using genetic algorithm. *Atmos. Environ.* 44 (32), 3926-3934. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.07.010>
- Lumbreras J., García-Martós C., Mira J. y Borge R. (2009). Computation of uncertainty for atmospheric emission projections from key pollutant sources in Spain. *Atmos. Environ.* 43 (8), 1557-1564. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.10.048>
- Lumbreras J., de Andrés J.M., Pérez J., Borge R., de la Paz D. y Rodríguez M.E. (2015). A methodology to estimate uncertainty for emission projections through sensitivity analysis. *J. Air Waste Manage. Assoc.* 65 (4), 384-394. <https://doi.org/10.1080/10962247.2014.996268>
- Mannschreck K., Klemp D., Kley D., Friedrich R., Kuhlwein J., Wickert B., Matuska P., Habram M. y Slemr F. (2002). Evaluation of an emission inventory by comparisons of modeled and measured emissions ratios of individual HCs, CO and NO_x. *Atmos. Environ.* 36, 81-94. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(02\)00211-X](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(02)00211-X)
- Mendoza-Domínguez A. y Russell A.G. (2001). Estimation of emission adjustments from the application of four-dimensional data assimilation to photochemical air quality modeling. *Atmos. Environ.* 35 (16), 2879-2894. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(01\)00084-X](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(01)00084-X)
- Mendoza A. y García M.R. (2011). Modelación inversa aplicada al análisis del inventario de emisiones de la Zona Metropolitana de Guadalajara, México. *Rev. Int. Contam. Ambie.* 27 (3), 199-214.

- Miller C.A., Hidy G., Hales J., Kolb C.E., Werner A.S., Haneke B., Parrish D., Frey H.C., Rojas-Bracho L., Deslauriers M., Pennell B. y Mobley J.D. (2012). Air emission inventories in North America: A critical assessment. *J. Air Waste Manage. Assoc.* 56, 1115–29. <https://doi.org/10.1080/10473289.2006.10464540>
- Mlawer E.J., Taubman S.J., Brown P.D., Iacono M.J. y Clough S.A. (1997). Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave. *J. Geophys. Res. Atmos.* 102, 16663–16682. <https://doi.org/10.1029/97JD00237>
- Mulholland M. y Seinfeld J.H. (1995). Inverse air pollution modeling of urban scale carbon monoxide emissions. *Atmos. Environ.* 29, 497–516. [https://doi.org/10.1016/1352-2310\(94\)00245-G](https://doi.org/10.1016/1352-2310(94)00245-G)
- Napelenok S.L., Pinder R.W., Gilliland A.B. y Martin R.V. (2008). A method for evaluating spatially resolved NO_x emissions using Kalman filter inversion, direct sensitivities and space-based NO₂ observations. *Atmos. Chem. Phys.* 8, 5603–5614. <https://doi.org/10.5194/acp-8-5603-2008>
- Pielke R.A. (1984). *Mesoscale meteorological modeling*. Academic Press, London.
- Raadgever G.T., Dieperink C., Driessen P.P.J., Smit A.A.H. y van Rijswijk H.F.M.W. (2011). Uncertainty management strategies: Lessons from the regional implementation of the Water Framework Directive in the Netherlands. *Environ. Sci. Policy*. 14, 64–75. <https://doi.org/10.1016/j.envsci.2010.11.001>
- Rew R.K. y Davis G.P. (1990). NetCDF: An interface for scientific data access. *IEEE Comput. Graph. Appl.* 10 (4), 76–82. <https://doi.org/10.1109/38.56302>
- Saide P., Osses A., Gallardo L. y Osses M. (2009). Adjoin inverse modeling of a CO emission inventory at the city scale: Santiago de Chile's case. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.* 9, 6325–6361. <https://doi.org/10.5194/acpd-9-6325-2009>
- Schultz C. (2008). Responding to scientific uncertainty in U.S. forest policy. *Environ. Sci. Policy*. 11, 253–71. <https://doi.org/10.1016/j.envsci.2007.09.002>
- SEDEMA (2016). Aviso por el que se da a conocer el Programa para Contingencias Ambientales Atmosféricas en la Ciudad de México. Secretaría del Medio Ambiente del Gobierno de la Ciudad de México. Gaceta Oficial de la Ciudad de México No. 44, 6 de abril.
- SEMARNAT (2002). Programa para Mejorar la Calidad del Aire de la Zona Metropolitana del Valle de México (ProAire) 2002–2010. Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Informe Final. Ciudad de México, México, 386 pp.
- SEMARNAT (2015). Guía para la elaboración de los programas de gestión para mejorar la calidad del aire (ProAire). Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Informe Final. Ciudad de México, México, 46 pp.
- SEMARNAT (2017). Se activa fase I de contingencia ambiental atmosférica por ozono. Comisión Ambiental de la Megalópolis (CAME). Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Comunicado de Prensa No. 47/2017. Ciudad de México, 15 de mayo [en línea]. <https://www.gob.mx/semarnat/prensa/se-activa-fase-i-de-contingencia-ambiental-atmosferica-por-ozono-107342?idiom=es-MX>
- Sowden M., Cairncross E., Wilson G., Zunckel M., Kirillova E., Reddy V. y Hietkamp S. (2008). Developing a spatially and temporally resolved emission inventory for photochemical modeling in the City of Cape Town and assessing its uncertainty. *Atmos. Environ.* 42 (30), 7155–7164. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.05.048>
- SSA (2014). Norma Oficial Mexicana NOM-020-SSA1-2014. Salud ambiental. Valor límite permisible para la concentración de ozono (O₃) en el aire ambiente y criterios para su evaluación. Secretaría de Salud. Diario Oficial de la Federación, 19 de agosto.
- Stephens S., Madronich F., Wu F., Olson J. B., Ramos R., Retama A. y Muñoz R. (2008). Weekly patterns of Mexico City's surface concentrations of CO, NO_x, PM₁₀ and O₃ during 1986–2007. *Atmos. Chem. Phys.* 8, 5313–5325. <https://doi.org/10.5194/acp-8-5313-2008>
- Stockwell W., Middleton P., Chang J. y Xiaoyan T. (1990). The second-generation Regional Acid Deposition Model chemical mechanism for regional air quality modeling. *J. Geophys. Res. Atmos.* 95, 16343–18367. <https://doi.org/10.1029/JD095iD10p16343>
- Streets D.G., Bond T.C., Carmichael G.R., Fernandes S.D., Fu Q., He D., Klimont Z., Nelson S.M., Tsai N.Y., Wang M.Q., Woo J.H. y Yarber K.F. (2003). The MICS-Asia Phase II emission inventory. En: *The Sixth Workshop on the Transport of Air Pollutants in Asia (Model Intercomparison StudydMICS-Asia)*. International Institute for Applied Systems Analysis, Laxenburg, Austria.
- Streit G.E. y Guzmán F. (1993). Mexico City Air Quality Research Initiative (MARI). *WIT Transactions on Ecology and the Environment* 1, 599–609.
- Streit G.E. y Guzmán F. (1996). Mexico City air quality: Progress of an international collaborative project to define air quality management options. *Atmos. Env.* 30 (5), 723–733. [https://doi.org/10.1016/1352-2310\(95\)00275-8](https://doi.org/10.1016/1352-2310(95)00275-8)
- Tie X., Madronich S., Li G.H., Ying Z., Zhang R., García A., Lee-Taylor J. y Liu Y. (2007). Characteristics of chemical oxidants in Mexico City: A regional chemical

- dynamical model (WRF-Chem) study. *Atmos. Environ.* 41, 1989-2008. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.10.053>
- Trejo V. (2017) Comparación de dos mecanismos químicos en la modelación de la calidad del aire en el Valle de México. Tesis de Licenciatura. Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México, México, 78 pp.
- Turtós L., Capote G., Fonseca Y., Álvarez L., Sánchez M., Bezanilla A., Borrajo I., Meneses R. y Pire S. (2013). Assessment of the Weather Research and Forecasting model implementation in Cuba addressed to diagnostic air quality modeling. *Atmos. Pollut. Res.* 4 (1), 64-74. <https://doi.org/10.5094/APR.2013.007>
- Watson J.G., Chow J.C. y Fujita E.M. (2001). Review of volatile organic compound source apportionment by chemical mass balance. *Atmos. Environ.* 35 (9), 1567-1584. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(00\)00461-1](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(00)00461-1)
- West J.J., Zavala M.A., Molina L.T., Molina M.J., San Martini F., McRae G.J., Sosa-Iglesias G. y Arriaga-Colina J.L. (2004). Modeling ozone photochemistry and Evaluation of hydrocarbon emissions in the Mexico City metropolitan area. *J. Geophys. Res.* 109, D19312. <https://doi.org/10.1029/2004JD004614>.
- Willmott C.J. (1981). On the validation of models. *Phys. Geogr.* 2, 184-194. <https://doi.org/10.1080/02723646.1981.10642213>
- Willmott C.J., Ackleson S.G., Davis R.E., Feddema J.J., Klink K.M., Legates D.R., O'Donnell J. y Rowe C.M. (1985). Statistics for the evaluation of model performance. *J. Geophys. Res.* 90, 8995-9005. <https://doi.org/10.1029/JC090iC05p08995>
- Ying Z., Shuiyuan C., Jianbing L., Jianlei L., Li L. y Dongsheng C. (2012). A new statistical modeling and optimization framework for establishing high-resolution PM₁₀ emission inventory – II. Integrated air quality simulation and optimization for performance improvement. *Atmos. Environ.* 60, 623-631. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.07.055>
- Yumimoto K. y Uno I. (2006). Adjoint inverse modeling of CO emissions over Eastern Asia using four-dimensional variational data assimilation. *Atmos. Environ.* 40, 6836-6845. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.05.042>
- Zhang D. y Anthes R.A. (1982). A high-resolution model of the planetary boundary layer – Sensitivity tests and comparisons with SESAME-70 Data. *J. Appl. Meteorol.* 21, 1594-1609. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1982\)021<1594:AHMOT>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1982)021<1594:AHMOT>2.0.CO;2)
- Zhang Y., Dubey M.K., Olsen S.C., Zheng J. y Zhang R. (2009). Comparisons of WRF-Chem simulations in Mexico City with ground-based RAMA measurements during the 2006-MILAGRO. *Atmos. Chem. Phys.* 9 (11) 3777-3798. <https://doi.org/10.5194/acp-9-3777-2009>