



# INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL



ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA E  
INDUSTRIAS EXTRACTIVAS

“POTENCIAL DE FORMACIÓN DE OZONO DE LAS  
FUENTES MÁS IMPORTANTES DE COV's EN LA ZONA  
METROPOLITANA DEL VALLE DE MÉXICO”

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
INGENIERA QUÍMICA INDUSTRIAL

PRESENTA:  
JULIETA GÓMEZ CRUZ

DIRECTORAS DE TESIS:  
Interna: M. en C. MARTHA ELENA GARCÍA RUÍZ  
Externa: DRA. MARÍA GABRIELA SÁNCHEZ REYNA



CIUDAD DE MÉXICO, 2018



T-114-17

Ciudad de México, 6 de noviembre del 2017.

A la C. Pasante:  
**JULIETA GÓMEZ CRUZ**

Boleta:  
**2009320768**

Carrera:  
**IQI**


Generación:  
**2009-2013**

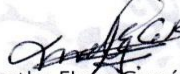
Mediante el presente se hace de su conocimiento que la Subdirección Académica a través de este Departamento autoriza que la C. **M. en C. Martha Elena García Ruiz** y la C. **Dra. María Gabriela Sánchez Reyna**, sean asesoras en el tema que propone usted desarrollar como prueba escrita en la opción **Tesis Individual**, con el título y contenido siguiente:

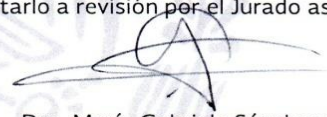
**"Potencial de formación de ozono de las fuentes más importantes de COV's en la zona metropolitana del Valle de México".**


Resumen.  
Introducción.  
I.- Generalidades.  
II.- Compuestos orgánicos volátiles.  
III.- Metodología para el tratamiento de datos.  
IV.- Resultados y Discusión.  
Conclusiones y recomendaciones.  
Referencias bibliográficas.  
Anexo

Se concede un plazo máximo de un año, a partir de esta fecha, para presentarlo a revisión por el Jurado asignado.

  
Ing. Martha Elena García Ruiz  
Presidenta de la Academia de  
Ingeniería Ambiental.

  
Ing. Martha Elena García Ruiz  
Directora Interna  
Ced. Prof. 0660820

  
Dra. María Gabriela Sánchez Reyna  
Directora de Tesis Externa  
Ced. Prof. 10166062

  
Ing. César Rodríguez Guerrero  
Jefe del Departamento de  
Evaluación y Seguimiento  
Académico.

  
Ing. Víctor Manuel Feregrino Hernández  
Subdirector Académico



**T-114-17**

Ciudad de México, a 13 de diciembre de 2017.

A la C. Pasante:  
**JULIETA GÓMEZ CRUZ**  
**PRESENTE**

Boleta: **2009320768** Carrera: **IQI** Generación: **2009-2013**

Los suscritos tenemos el agrado de informar a usted, que habiendo procedido a revisar el borrador de la modalidad de titulación correspondiente denominado:


**"Potencial de formación de ozono de las fuentes más importantes de COV's en la zona metropolitana del Valle de México"**


encontramos que el citado Trabajo escrito de **Tesis Individual**, reúne los requisitos para autorizar el Examen Profesional y **PROCEDER A SU IMPRESIÓN** según el caso, debiendo tomar en consideración las indicaciones y correcciones que al respecto se le hicieron.

Atentamente  
**JURADO**

  
Ing. Juan Manuel Moreyra Mercado  
**Presidente**

  
Ing. Enrique Rico Arzate  
**Secretario**

  
M. en C. Martha Elena García Ruiz  
**1er. Vocal**

  
Ing. Margarita Coronado Maldonado  
**2º Vocal**

  
Dra. María Gabriela Sánchez Reyna  
**3er. Vocal**

## *Agradecimientos*

*Gracias a Dios por su amor y fidelidad, por el don de la vida y por la familia que me ha regalado.*

*Agradezco especialmente a mis padres Angela Julieta y José, por su empeño, esfuerzo y dedicación, por su inmenso amor y la motivación que siempre me han dado para continuar aun en los momentos más adversos. Gracias papás por ser el motor de mi vida, los ¡amo!*

*A mis hermanas Gaby, Adry, Kary y Faby, mi hermano José, por su apoyo, consejos, travesuras y convivencia, los ¡quiero mucho!*

*A mis amigas Rosario, Yesenia, Alejandra, Norma por su apoyo, su tiempo y compartir momentos buenos y no tan buenos, ¡las llevo en mi corazón chicas!*

*A Luis por ser mi compañero de vida y apoyarme en todo este caminar, por motivarme a seguir adelante, y convivir momentos alegres y no tan alegres, ¡te amo!*

*Quiero agradecer especialmente al Instituto Politécnico Nacional por brindarme estudios, desde el nivel medio superior y superior, a todos mis profesores que sin duda influyeron para llegar a culminar mi profesión y a todos aquellos que directamente o indirectamente hicieron posible este logro.*

*Gracias a la ESIQIE por ser la escuela que me dio la oportunidad de formarme como ingeniera química, ¡Huelum!*

*Gracias al Instituto Mexicano del Petróleo por brindarme el realizar este trabajo de tesis, y especialmente gracias a la Dra. María Gabriela Sánchez por su tiempo, paciencia, conocimientos, dirección y motivación durante todo el trayecto de mi tesis, ¡muchas gracias Dra. Gaby!*

*Agradezco a la Maestra Martha Elena García por su apoyo, dirección y guía en los trámites de titulación, por su tiempo para leer este trabajo de tesis y realizar las correspondientes sugerencias y correcciones, que enriquecieron este trabajo.*

*Gracias a los Maestros Margarito Coronado, Enrique Rico y Juan Manuel Moreyra por su dedicación y tiempo para leer este trabajo de tesis, por sus revisiones, correcciones, observaciones y sugerencias para mejora de este trabajo de tesis.*

***Julieta G.***

# Índice General

<i>Índice de Figuras</i> .....	<i>i</i>
<i>Índice de Tablas</i> .....	<i>iii</i>
<i>Abreviaturas</i> .....	<i>v</i>
<i>Resumen</i> .....	<i>ix</i>
<i>Introducción</i> .....	<i>x</i>
<i>Objetivos</i> .....	<i>xi</i>
<b>Capítulo 1 Generalidades</b> .....	<b>1</b>
<b>1.1 Atmósfera terrestre</b> .....	<b>1</b>
<b>1.2 Contaminantes atmosféricos</b> .....	<b>4</b>
<b>1.3 Ozono Estratosférico</b> .....	<b>5</b>
<b>1.4 Ozono Troposférico</b> .....	<b>6</b>
<b>1.5 Comportamiento del Ozono en la Zona Metropolitana del Valle de México</b> .....	<b>12</b>
<b>Capítulo 2 Compuestos Orgánicos Volátiles</b> .....	<b>15</b>
<b>2.1 Definición de Compuestos Orgánicos Volátiles</b> .....	<b>15</b>
2.1.1 Clasificación de Compuestos Orgánicos Volátiles .....	16
2.1.2 Presencia de Compuestos Orgánicos Volátiles en la atmósfera de la Zona Metropolitana del Valle de México.....	17
<b>2.2 Mediciones de Compuestos Orgánicos Volátiles en la Zona Metropolitana del Valle de                 México.</b> .....	<b>18</b>
<b>2.3 Reactividad Fotoquímica de los COV's.</b> .....	<b>21</b>
2.3.1 Escalas y Métodos para el Cálculo de la Reactividad Fotoquímica de los Compuestos Orgánicos Volátiles.....	23
<b>Capítulo 3 Metodología para el tratamiento de datos</b> .....	<b>26</b>
<b>3.1 Lugar de estudio</b> .....	<b>26</b>
<b>3.2 Fuente de datos</b> .....	<b>26</b>
<b>3.3 Construcción de la Base de Datos de Compuestos Orgánicos Volátiles 2002-2006</b> .....	<b>30</b>
<b>3.4 Tratamientos estadísticos utilizados</b> .....	<b>32</b>

3.5	<b>Cálculo del Potencial de Formación de Ozono (POCP) para fuentes de Compuestos Orgánicos Volátiles.....</b>	<b>32</b>
<b>Capítulo 4 Resultados y Discusión ..... 35</b>		
4.1	<b>Estadística descriptiva de Compuestos Orgánicos Volátiles .....</b>	<b>35</b>
4.2	<b>Estadística descriptiva de Óxidos de nitrógeno y Ozono .....</b>	<b>37</b>
4.3	<b>Asociaciones entre variables.....</b>	<b>41</b>
4.3.1	Matriz de correlación.....	42
4.3.2	Análisis de Factores.....	43
4.3.3	Ecuación empírica de ajuste.....	46
4.4	<b>Potencial de formación de Ozono (POCP) de diversas fuentes de COV's .....</b>	<b>50</b>
4.5	<b>Análisis de los casos de concentraciones máximas y mínimas de Ozono .....</b>	<b>54</b>
4.5.1	Casos de concentraciones máximas de Ozono.....	55
4.5.2	Casos de concentraciones mínimas de Ozono .....	67
<b>Conclusiones y Recomendaciones.....</b>		<b>76</b>
<b>Referencias Bibliográficas.....</b>		<b>79</b>
<b>Anexo Base de Datos para el Cálculo del POCP<sub>F</sub> de COV's en la ZMVM.....</b>		<b>83</b>
<b>Anexo Desarrollo de la ecuación empírica de ajuste.....</b>		<b>92</b>

# Índice de Figuras

## Capítulo 1

<b>Figura 1.1</b>	División de la atmósfera en capas en función de la temperatura [Seoáñez, 2002].....	3
<b>Figura 1.2</b>	Fuentes de contaminación precursoras de Ozono.....	8
<b>Figura 1.3</b>	Tendencia de la concentración de Ozono en la ZMVM de los años de 1986 al 2016.....	13
<b>Figura 1.4</b>	Tendencia del IMECA por Ozono en la ZMVM de los años de 1992 al 2016.....	14

## Capítulo 2

<b>Figura 2.1</b>	Representación esquemática de las rutas químicas atmosféricas de los Compuestos Orgánicos Volátiles[Jenkin, et al. 2008].....	22
-------------------	---	----

## Capítulo 3

<b>Figura 3.1</b>	Mapa de la ZMVM mostrando la ubicación de las estaciones del Sistema de Monitoreo Atmosférico utilizadas en este trabajo.....	27
-------------------	---	----

## Capítulo 4

<b>Figura 4.1</b>	Estadística descriptiva de las concentraciones de COV's a lo largo del día .....	38
<b>Figura 4.2</b>	Estadística descriptiva de las concentraciones de NO <sub>2</sub> (a), NO <sub>x</sub> (b) y Ozono (c) por sitio.....	39
<b>Figura 4.3</b>	Estadística descriptiva de las concentraciones de NO <sub>2</sub> (a), NO <sub>x</sub> (b) y Ozono (c) por año...	40
<b>Figura 4.4</b>	Variación horaria de las concentraciones de Ozono, NO <sub>2</sub> y NO <sub>x</sub> a lo largo del día.....	41
<b>Figura 4.5</b>	Gráfica de paridad entre valores de concentraciones de Ozono observados y estimados en función de COV's en Merced.....	48
<b>Figura 4.6</b>	Gráfica de paridad entre valores de concentraciones de Ozono observados y estimados en función de COV's en Xalostoc .....	48
<b>Figura 4.7</b>	Gráfica de paridad entre valores de concentraciones de Ozono observados y estimados en función de COV's en Tlalnepantla.....	49



<b>Figura 4.8</b>	Gráfica de paridad entre valores de concentraciones de Ozono observados y estimados en función de COV's en Pedregal .....	49
<b>Figura 4.9</b>	Pedregal 221 puntos IMECA (243 ppb).....	56
<b>Figura 4.10</b>	Rosas de los vientos observadas el: a) 13/02/2002, b) 14/02/2002 c)15/02/2002.....	57
<b>Figura 4.11</b>	Tlalnepantla 174 puntos IMECA (191 ppb).....	58
<b>Figura 4.12</b>	Rosas de los vientos observadas el: a) 16/02/2002, b) 17/02/2002, c)18/02/2002.....	60
<b>Figura 4.13</b>	Xalostoc 174 puntos IMECA (191 ppb).....	61
<b>Figura 4.14</b>	Rosas de los vientos observadas el: a) 21/04/2003, b) 22/04/2003 c) 23/04/2003.....	62
<b>Figura 4.15</b>	Xalostoc 171 puntos IMECA (188 ppb).....	63
<b>Figura 4.16</b>	Rosas de los vientos observadas el: a) 22/04/2003, b) 23/04/2003 c) 24/04/2003.....	64
<b>Figura 4.17</b>	Pedregal 170 puntos IMECA (187 ppb).....	65
<b>Figura 4.18</b>	Rosas de los vientos observadas el: a) 03/05/2006, b) 04/05/2006 c) 05/05/2006.....	66
<b>Figura 4.19</b>	Tlalnepantla 15 puntos IMECA (17 ppb).....	68
<b>Figura 4.20</b>	Rosas de los vientos a) 10/02/2002, b) 11/02/2002 c) 12/02/2002.....	69
<b>Figura 4.21</b>	Xalostoc 12 puntos IMECA (13 ppb).....	70
<b>Figura 4.22</b>	Rosas de los vientos observadas el: a) 03/10/2005, b) 04/10/2005 c) 05/10/2005.....	71
<b>Figura 4.23</b>	Merced 25 puntos IMECA (28 ppb).....	72
<b>Figura 4.24</b>	Rosas de los vientos observadas el: a) 08/07/2006, b) 09/07/2006 c) 10/07/2006.....	73
<b>Figura 4.25</b>	Merced 20 puntos IMECA (22 ppb).....	74
<b>Figura 4.26</b>	Rosas de los vientos observadas el: a) 12/09/2006, b) 13/09/2006 c) 14/09/2006.....	75

# Índice de Tablas

## Capítulo 1

<b>Tabla 1.1</b>	Composición típica de la atmósfera limpia a nivel del mar [Molina, 2002].....	2
<b>Tabla 1.2</b>	Efectos sobre la salud humana por Ozono, conforme el IMECA.....	9
<b>Tabla 1.3</b>	Efectos del Ozono en el medio ambiente.....	11

## Capítulo 2

<b>Tabla 2.1</b>	Clasificación de Compuestos Orgánicos Volátiles en función de su peso molecular y estructura molecular.....	17
<b>Tabla 2.2</b>	Clasificación de Compuestos Orgánicos Volátiles en función de su volatilidad (Criterio U.S. EPA).....	17
<b>Tabla 2.3</b>	Características de los COV's presentes en la atmósfera ZMVM [Granados, et al. 2010].....	18
<b>Tabla 2.4</b>	Resumen de algunas mediciones de COV's en la ZMVM.....	19
<b>Tabla 2.5</b>	Fuentes de COV's en la ZMVM de acuerdo con los IE.....	20
<b>Tabla 2.6</b>	Fuentes de COV's tóxicos en la ZMVM de acuerdo con los Inventarios de Contaminantes Tóxicos.....	21
<b>Tabla 2.7</b>	Comparación de diferentes escalas de reactividad para algunos Compuestos Orgánicos Volátiles [Derwent, 1998].....	25

## Capítulo 3

<b>Tabla 3.1</b>	Segmento de la Base de datos de concentración de COV's del IMP (2002 y 2003)...	28
<b>Tabla 3.2</b>	Segmento de la Base de datos de concentración de COV's del GDF (2005 y 2006)..	29
<b>Tabla 3.3</b>	Variables de la Base General de Datos de COV's 2002-2006.....	30
<b>Tabla 3.4</b>	Segmento de la Base de Datos General de COV's 2002-2006.....	31
<b>Tabla 3.5</b>	Fuentes de COV's que cuentan con perfil de emisión e incluidas en el IE 2006.....	34

**Capítulo 4**

<b>Tabla 4.1</b>	Estadística descriptiva de las concentraciones de COV's por sitio de muestreo.....	36
<b>Tabla 4.2</b>	Estadística descriptiva de las concentraciones de COV's (ppbC) durante 2002-2006 en la ZMVM.....	37
<b>Tabla 4.3</b>	Matriz de correlación (Pearson) de los contaminantes en a) Tlalnepantla, b) Xalostoc, c) Merced, d) Pedregal	42
<b>Tabla 4.4</b>	Resultado del Análisis de Factores para los sitios de Tlalnepantla, Xalostoc, Merced y Pedregal.....	44
<b>Tabla 4.5</b>	COV's de mayor relación con el Ozono de acuerdo a los resultados del Análisis de Factores.....	45
<b>Tabla 4.6</b>	Ecuación de ajuste para estimar las concentraciones de Ozono en función de ciertos COV's.....	47
<b>Tabla 4.7</b>	Fuentes de COV's ordenadas de mayor a menor conforme a los resultados del $POCP_F$ .....	52
<b>Tabla 4.8</b>	Casos de concentración máxima de Ozono.....	55
<b>Tabla 4.9</b>	Casos de concentración mínima de Ozono.....	67

# Abreviaturas

<b>1BUTE:</b>	1-buteno
<b>1HEXE:</b>	1-hexeno
<b>1PENTE:</b>	1-penteno
<b>123MBENCE:</b>	1,2,3-trimetilbenceno
<b>124MBENCE:</b>	1,2,4-trimetilbenceno
<b>124MCHEXA:</b>	1,2,4 trimetilciclohexano
<b>13BUTADIE:</b>	1,3-butadieno
<b>135MBENCE:</b>	1,3,5-trimetilbenceno
<b>2MHEPTA:</b>	2-metilheptano
<b>2MHEXA:</b>	2-metilhexano
<b>2MPENTA:</b>	2-mepentano
<b>2MPENTA/3MPENTA:</b>	2-mepentano/3-mepentano
<b>22MBUTA:</b>	2,2-dimetilbutano
<b>224MPENTA:</b>	2,2,4-trimetilpentano
<b>23MBUTA:</b>	2,3-dimetilbutano
<b>23MPENTA:</b>	2,3-dimetilpentano
<b>234MPENTA:</b>	2,3,4-trimetilpentano
<b>24MHEXA:</b>	2,4-dimetil hexano
<b>24MPENTA:</b>	2,4-dimetilpentano
<b>25MHEXA:</b>	2,5-dimetil hexano
<b>2M1BUTE:</b>	2-metil-1-buteno
<b>2M2BUTE:</b>	2-metil-2-buteno
<b>3MPENTA:</b>	3-mepentano
<b>3MHEXA:</b>	3-metilhexano
<b>ACETIL:</b>	Acetileno
<b>BENCE:</b>	Benceno
<b>C de la ZMVM:</b>	Centro de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México
<b>C2BUTE:</b>	c-2-buteno
<b>C2PENTE:</b>	c-2-penteno
<b>CHEXA:</b>	Ciclohexano

<b>CO:</b>	Monóxido de carbono
<b>COT:</b>	contaminantes tóxicos
<b>COV's o COV:</b>	Compuestos Orgánicos Volátiles
<b>COV's totales:</b>	Compuestos Orgánicos Volátiles totales
<b>CPA:</b>	contaminantes peligrosos del aire
<b>CPENTA:</b>	Ciclopentano
<b>C.V.:</b>	coeficiente de variación
<b>DECA:</b>	Decano
<b>DODECA:</b>	Dodecano
<b>ESTIRE:</b>	Estireno
<b>ETAN:</b>	Etano
<b>EACETA:</b>	etil acetato
<b>EBENCE:</b>	Etilbenceno
<b>ETILE:</b>	Etileno
<b>gas LP o GLP:</b>	gas licuado de petróleo
<b>GDF:</b>	Gobierno del Distrito Federal
<b>HEPTA:</b>	Heptano
<b>HEXA:</b>	Hexano
<b>iBUTA:</b>	iso-butano
<b>iBUTE:</b>	iso-buteno
<b>ICT:</b>	Inventario de Emisiones de Contaminantes Tóxicos
<b>IE:</b>	Inventario de Emisiones
<b>IMP:</b>	Instituto Mexicano del Petróleo
<b>IMECA:</b>	Índice Metropolitano de la Calidad del Aire
<b>INECC:</b>	Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático
<b>ioCTA:</b>	iso-octano
<b>iPENTA:</b>	iso-pentano
<b>iPBENCE:</b>	iso-propilbenceno
<b>ISOPRE:</b>	Isopreno
<b>LGEEPA:</b>	Ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección al Ambiente
<b>MAX:</b>	Máximo
<b>MCHEXA:</b>	Metilciclohexano
<b>MCPENTA:</b>	Metilciclopentano

<b>mDEBENCE:</b>	m-dietilbenceno
<b>MER:</b>	Merced
<b>mETOLUE:</b>	m-etiltolueno
<b>MIN:</b>	Mínimo
<b>MIR (por sus siglas en inglés):</b>	Escala de Reactividad Máxima
<b>mpXILE:</b>	m-p-xileno
<b>MTBE:</b>	Metil ter-butil éter
<b>mXILE:</b>	m-xileno
<b>NADF:</b>	Norma Ambiental del Distrito Federal
<b>nBUTA:</b>	n-butano
<b>NE de la ZMVM:</b>	Noreste de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México
<b>NO de la ZMVM:</b>	Noroeste de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México
<b>NO:</b>	Monóxido de nitrógeno
<b>NO<sub>2</sub>:</b>	dióxido de nitrógeno
<b>NO<sub>x</sub>:</b>	óxidos de nitrógeno
<b>NONA:</b>	Nonano
<b>NOM:</b>	Normas Oficiales Mexicanas
<b>nPBENCE:</b>	n-propilbenceno
<b>nUNDECA:</b>	n-undecano
<b>OCTA:</b>	Octano
<b>oETOLUE:</b>	o-etiltolueno
<b>OH:</b>	Radical hidroxilo
<b>oXILE:</b>	o-xileno
<b>O<sub>2</sub>:</b>	Oxígeno
<b>O<sub>3</sub>:</b>	Ozono
<b>P<sub>10</sub></b>	Percentil 10
<b>P<sub>25</sub></b>	Percentil 25
<b>P<sub>75</sub></b>	Percentil 75
<b>P<sub>90</sub></b>	Percentil 90
<b>Pb:</b>	Plomo
<b>pDEBENCE:</b>	p-dietilbenceno
<b>PED:</b>	Pedregal
<b>PENTA:</b>	Pentano

<b>pETOLUE:</b>	p-etil tolueno
<b>PM<sub>10</sub> y PM<sub>2.5</sub>:</b>	Partículas suspendidas
<b>POCP (por sus siglas en inglés):</b>	Potencial de Formación de Ozono
<b>POCP<sub>F</sub>:</b>	Potencial de Formación de Ozono de la fuente de compuestos orgánicos volátiles
<b>POCP<sub>i</sub>:</b>	Potencial de Formación de Ozono de un hidrocarburo en particular
<b>pPBENCE:</b>	p-propil benceno
<b>PROPA:</b>	Propano
<b>PROPIL:</b>	Propileno
<b>PROPINO:</b>	propino(metil acetileno)
<b>pXILE:</b>	p-xileno
<b>RO<sub>2</sub>:</b>	radicales de peróxidos orgánicos
<b>SEMARNAT:</b>	Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales
<b>SIMAT:</b>	Sistema de Monitoreo Atmosférico
<b>SMA:</b>	Secretaría del Medio Ambiente
<b>SO de la ZMVM:</b>	Suroeste de la Zona Metropolitana de la Ciudad de México
<b>SO<sub>2</sub>:</b>	Dióxido de azufre
<b>STATISTICA<sup>MR</sup>:</b>	paquete estadístico STATISTICA <sup>MR</sup>
<b>T2BUTE:</b>	t-2-buteno
<b>TLA:</b>	Tlalnepantla
<b>TOLUE:</b>	Tolueno
<b>T2PENTE:</b>	t-2-penteno
<b>U.S. EPA (por sus siglas en inglés):</b>	Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos de América
<b>XAL:</b>	Xalostoc
<b>ZMVM:</b>	Zona Metropolitana de la Ciudad de México

## *Resumen*

En esta tesis se aborda el problema de contaminación por Ozono en la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM) mediante el cálculo y evaluación del Potencial de Formación de Ozono ( $POCP_F$ ) de las fuentes de compuestos orgánicos volátiles (COV's) más importantes de la ZMVM. Para tal fin, se compilaron: 1) los valores del  $POCP_i$  (Potencial de Formación de Ozono de un hidrocarburo en particular) para diferentes COV's determinados por Derwent et al. (2007), 2) la información del perfil de emisión, que contiene la especiación química de las emisiones y 3) el inventario de emisiones desarrollado para la ZMVM (IE ZMVM 2006), que especifica la cantidad de emisiones por fuente. Con estas tres bases de datos se obtuvo el  $POCP_F$  para fuentes móviles (autos a gasolina, diésel), fijas (procesos que emplean compuestos orgánicos) y de área (manejo y distribución de gas L.P.). Esta es una aproximación novedosa en el estudio de la generación de Ozono y los resultados pueden apoyar en el desarrollo de planes de control de la contaminación atmosférica y aportar sugerencias para mejorar la calidad del aire en la ZMVM.

Paralelo al trabajo central, se analizan las concentraciones de 70 COV's medidos en cuatro sitios de la ZMVM durante los años 2002, 2003, 2005 y 2006. Se estudia la variación temporal y espacial de las concentraciones totales e individuales así como la relación entre ellos mediante métodos estadísticos, también se desarrollan ecuaciones para estimar la concentración de Ozono en función de ciertos COV's.

Como estudio complementario se examinan las condiciones ambientales que dieron origen a concentraciones extremas de Ozono, es decir tanto mínimas como máximas. Para ello, se evalúa la meteorología de superficie (temperatura y vientos principalmente) y las concentraciones de precursores de Ozono registradas 72 horas antes del caso de estudio.



## *Introducción*

Uno de los problemas ambientales más graves que enfrenta la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM) son las concentraciones altas de Ozono, que con frecuencia exceden los valores que se consideran seguros para la salud humana y el ambiente. Si bien se han puesto en marcha distintas acciones para controlar los niveles de este contaminante, los resultados han sido parciales.

En este trabajo de tesis se aborda el problema de la contaminación por Ozono en la ZMVM mediante la evaluación del potencial de formación de Ozono de las principales fuentes de compuestos orgánicos volátiles (COV's). Los COV's, como se sabe, son precursores del Ozono emitidos por un gran número de actividades y procesos. El fundamento de este trabajo está basado en la diferente reactividad particular de cada COV que le confiere una capacidad máxima de producir Ozono, llamada Potencial de Formación de Ozono [POCP, Derwent, et al. 2007] la cual ha sido estimada por métodos tanto experimentales como teóricos. Para lograr el objetivo de este trabajo se compilan los valores de  $POCP_i$  y se combinan con los Inventarios de Emisiones para la ZMVM y los perfiles de emisión de las principales fuentes de COV's para obtener una estimación del  $POCP_F$ . Esta aproximación no ha sido contemplada en los trabajos que buscan evaluar la contribución de las fuentes de COV's en la generación de Ozono. Con los resultados se espera contribuir al conocimiento de la producción de Ozono en la ZMVM y aportar información útil en el desarrollo de planes de control de la contaminación atmosférica.

# Objetivos

## **General**

Calcular el Potencial de Formación de Ozono ( $POCP_F$ ) de las fuentes de Compuestos Orgánicos Volátiles (COV's) más importantes en la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM).

## **Particulares**

- Analizar la variación en las concentraciones de COV's en la ZMVM (2002, 2003, 2005 y 2006).
- Obtener el valor de  $POCP_F$  para los COV's medidos en la ZMVM.
- Compilar la contribución de las fuentes de COV's en la ZMVM de acuerdo al Inventario de Emisiones (IE).
- Obtener los perfiles de emisión de las fuentes de COV's en la ZMVM.
- Analizar las condiciones ambientales que generan concentraciones extremas de Ozono.

# *Capítulo 1*

## *Generalidades*

El aire es un componente natural esencial para el desarrollo de la vida en la tierra, sin él, nuestro planeta estaría muerto y no existirían las plantas, los animales y tampoco el ser humano.

Por lo cual, un aire contaminado representa una amenaza para la salud del hombre, así como daños a la vegetación, animales, y ambiente en general. Sin embargo, desde tiempos remotos el ser humano ha realizado diversas actividades que provocan la contaminación de la atmósfera, desde encender una antorcha para iluminar las cavernas donde habitaba, hasta hoy en día, por ejemplo, con el uso de automóviles y el desarrollo de actividades industriales, comerciales y domésticas.

Afortunadamente existe una preocupación cada vez mayor por regular y procurar una mejor calidad del aire. En México, a través de dependencias gubernamentales como la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT), se emiten la Ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección al Ambiente (LGEEPA) y las Normas Oficiales Mexicanas (NOM) en materia de contaminación del aire que regulan las emisiones y la concentración máxima permisible de varios compuestos químicos en la atmósfera.

### **1.1 *Atmósfera terrestre***

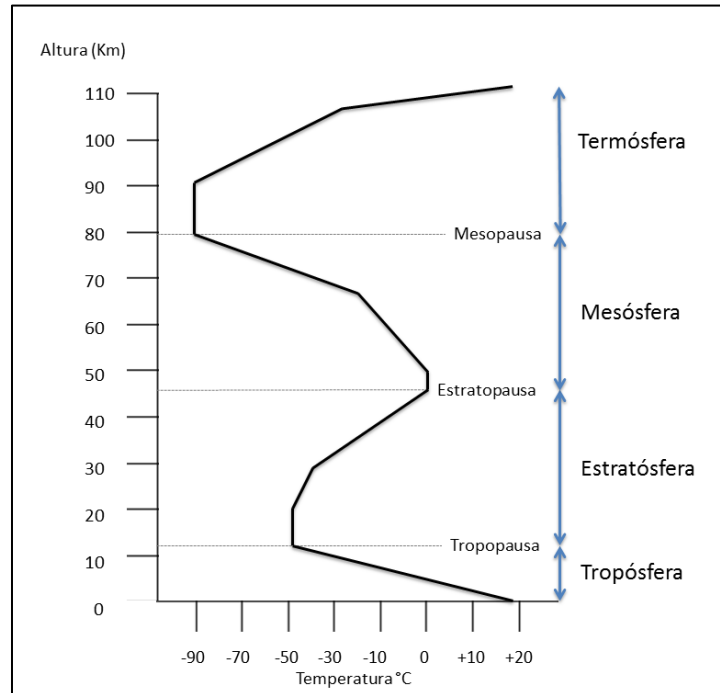
La atmósfera terrestre es una envoltura de gases que rodea a la tierra debido a la acción de la fuerza gravitatoria. Su límite inferior son los continentes y océanos; se extiende más allá de 1000 km de altura. La densidad de la atmósfera disminuye

con la altura a medida que la presión atmosférica disminuye, de manera que en los primeros 5 km se encuentra contenida la primera mitad de su masa total. El aire en la atmósfera está compuesto por una mezcla de gases, como se describe en la Tabla 1.1

**Tabla 1.1** Composición típica de la atmósfera limpia a nivel del mar [Molina, 2002].

Componente	Fórmula	Porcentaje volumen	(ppm) volumen
Gases permanentes			
Nitrógeno	N <sub>2</sub>	78.084	
Oxígeno	O <sub>2</sub>	20.946	
Argón	Ar	0.934	
Neón	Ne		18.2
Helio	He		5.2
Kriptón	Kr		1.1
Hidrógeno	H <sub>2</sub>		0.5
Óxido de nitrógeno	N <sub>2</sub> O		0.3
Xenón	Xe		0.09
Gases variables			
Vapor de agua	H <sub>2</sub> O	0.01-7	
Dióxido de carbono	CO <sub>2</sub>	0.035	
Metano	CH <sub>4</sub>		1.5
Monóxido de carbono	CO		0.1
Ozono	O <sub>3</sub>		0.02
Amoniaco	NH <sub>3</sub>		0.01
Dióxido de nitrógeno	NO <sub>2</sub>		0.001
Dióxido de azufre	SO <sub>2</sub>		0.0002
Sulfuro de hidrógeno	H <sub>2</sub> S		0.0002

La atmósfera se clasifica en diferentes regiones de acuerdo a criterios como la temperatura, densidad o composición química. Debido a que la temperatura de la atmósfera experimenta grandes variaciones en función de la altitud, y en función de estas variaciones y desde el punto de vista de dispersión de los contaminantes, se da la siguiente clasificación (Figura 1.1).



**Figura 1.1** División de la atmósfera en capas en función de la temperatura [Seoánez, 2002].

- **Tropósfera:** Se extiende desde la superficie del planeta hasta los 12 km de altura. Se caracteriza por la existencia de turbulencias y por la continua mezcla de gases. En ella se encuentra contenido el 80% de la masa total de gases de la atmósfera, y casi la totalidad del vapor de agua, las nubes y los aeroloes. El cambio de temperatura que produce su límite superior, la tropopausa, actúa como obstáculo de los procesos convectivos, dificultando el intercambio de materia con la estratósfera. La temperatura disminuye de forma constante conforme aumenta la altura de la tropósfera a razón de 0.65°C cada 100metros. Aunque normalmente se sitúa la tropopausa en los 12 km de altura, este valor no es continuo en toda la atmósfera, ya que el espesor de la tropopausa es distinto en función de la latitud.
  
- **Estratósfera:** Se encuentra entre los 12 y los 50 km de altura. En los primeros 20 km la temperatura permanece constante. A partir de los 30 km de altura la temperatura aumenta debido a la abundante presencia de Ozono, que absorbe la radiación solar ultravioleta, alcanzando en la

estratopausa una temperatura de 0°C. La máxima concentración de Ozono se encuentra en la capa de aire comprendida entre los 20 y 25 km de altura.

- Mesósfera: Situada entre los 50 y 80 km de altura. En la mesósfera la presencia de Ozono va desapareciendo rápidamente con la altura, lo que hace que la temperatura disminuya desde los 0°C de la estratopausa hasta los -90°C de la mesopausa. Se compone de bajas concentraciones de nitrógeno, hidrógeno y helio.
- Termósfera: Se extiende desde los 80 km de altura hasta el límite difuso entre la atmósfera y el espacio situado a más de 1000 km de distancia de la superficie terrestre. La densidad de esta capa es muy baja, y se compone principalmente de oxígeno y nitrógeno en estado molecular o atómico [Stanley, 2011].

El presente estudio se enfoca a la tropósfera, que es la capa de mayor importancia referente a los seres vivos, incluyendo al hombre, y donde tienen lugar la mayor parte de los fenómenos meteorológicos. Además, existen muchas áreas urbanas que sufren de contaminación del aire a nivel de suelo, debido a altos niveles de concentración de diferentes contaminantes como el Ozono (O<sub>3</sub>). La Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM) registra en la actualidad altos niveles de Ozono, como se detallará más adelante.

## **1.2 Contaminantes atmosféricos**

Los contaminantes se clasifican en contaminantes criterio y contaminantes peligrosos del aire (CPA), siendo los del primer grupo perjudiciales para la salud y bienestar humano. Este grupo comprende al Dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>), el cual, es un importante precursor de lluvia ácida y partículas suspendidas; Monóxido de carbono (CO), gran parte de este contaminante se genera en los escapes de los vehículos de combustión interna; Dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>), que está involucrado

en la formación de ozono troposférico, aerosoles y lluvia ácida; Ozono (O<sub>3</sub>), producto de la reacción fotoquímica entre los óxidos de nitrógeno y los compuestos orgánicos volátiles; Partículas suspendidas (PM<sub>10</sub> y PM<sub>2.5</sub>), éstas son emitidas de manera natural o por actividades humanas, también se pueden formar en la atmósfera de reacciones químicas; y Plomo (Pb), derivado de actividades industriales como la explotación minera, metalúrgica, refinación de metales, fabricación de pinturas y soldadura [SIMAT, 2016].

Los CPA son un conjunto de compuestos que pueden causar efectos serios e irreversibles en la salud humana, como los compuestos orgánicos volátiles (COV's), que se estudiarán en el Capítulo 2 de este trabajo de tesis.

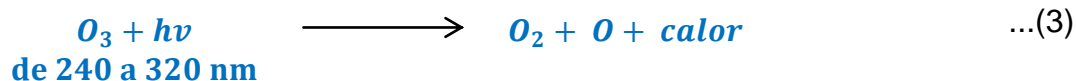
### 1.3 Ozono Estratosférico

El Ozono se produce de manera natural durante las tormentas eléctricas por el paso de descargas a través de la atmósfera, se encuentra en la estratósfera en la llamada “capa de Ozono”.

Aproximadamente entre los 16 y 40 km (en la estratósfera) la radiación ultravioleta proveniente del sol choca con moléculas de oxígeno. Especialmente, alrededor de los 25 km, las radiaciones con longitud de onda inferior a 242 nanómetros (nm) son absorbidas por este elemento que se descompone y se recombina para formar el Ozono, de acuerdo con las ecuaciones (1) y (2):



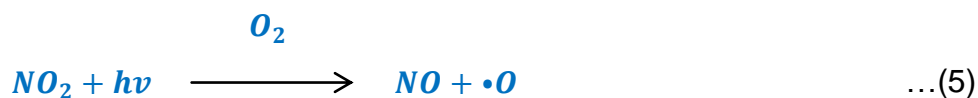
Donde M es la partícula absorbidora. A su vez, el Ozono formado absorbe la radiación ultravioleta con longitud de onda entre 240 y 320 nm, descomponiéndose en (ecuación 3):



Estas tres ecuaciones forman el ciclo dinámico del Ozono-oxígeno. El balance global da por resultado que tanto la concentración de Ozono como la de oxígeno se mantengan constante, pero con una transformación neta de la radiación ultravioleta a calor. De tal manera que la parte dañina de la luz solar para los seres vivos es eliminada [Jiménez, 2012].

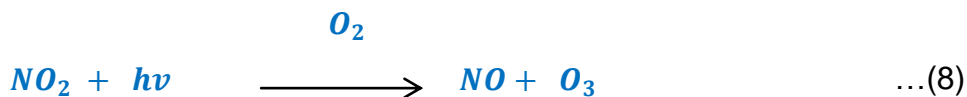
## 1.4 Ozono Troposférico

Los COV's participan en las reacciones de formación de Ozono troposférico cuando reaccionan con los óxidos de nitrógeno bajo influencia de la luz solar. El paso principal en este proceso es la conversión del NO a NO<sub>2</sub>, por los radicales peróxido. En ausencia de los COV's las reacciones proceden de la siguiente manera:

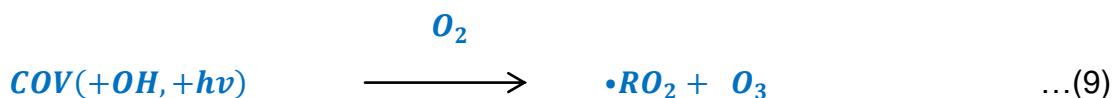


Las reacciones de los COV's con radicales •OH, o su fotólisis, promueven la formación del radical •HO<sub>2</sub> y los radicales de peróxidos orgánicos (•RO<sub>2</sub>), los cuales reaccionan con NO en condiciones de alta concentración de NO:





En total:



A diferencia del Ozono, que se forma en la atmósfera y por ello se clasifica como contaminante secundario, existen los contaminantes primarios, emitidos a la atmósfera como resultado de un proceso natural o antropogénico, como los NOx y COV's. Las fuentes naturales de contaminación atmosférica pueden ser por erupciones volcánicas, incendios forestales, producción de gases en pantano, diseminación de polen por el viento, etc. Las fuentes antropogénicas de contaminación atmosférica son los automotores, que incluyen todo tipo de transporte: autos particulares, motocicletas, camiones de carga, ferrocarriles, aviones, helicópteros, entre otros, los motores de los vehículos son los responsables de las emisiones de NOx, COV's, CO y SO<sub>2</sub>, producido durante la combustión. Las fuentes fijas se derivan de la generación de energía eléctrica y de actividades industriales como la industria química, textil, alimentaria, maderera, metalúrgica, manufacturera, entre otras. Los principales contaminantes emitidos son el SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, CO<sub>2</sub>, CO e hidrocarburos [INECC, 2015].

Las fuentes de precursores de Ozono troposférico incluyen las industriales que emiten el 20% del total de COV's, siendo la industria química la fuente principal de contaminación; las fuentes móviles, principalmente los autos particulares, taxis y autobuses que emiten el 53% de los NOx, respecto a los COV's, el 10% es emitido por motores de autos particulares y el 8% por motocicletas; las actividades domésticas, que generan el 30% de COV's y, 2% de NOx, por el uso de

cosméticos, limpiadores, recubrimientos para el hogar, fugas de gas LP y por el uso de calentadores y estufas [SIMAT, 2016]. En la Figura 1.2 se ilustran algunas fuentes de precursores de Ozono.

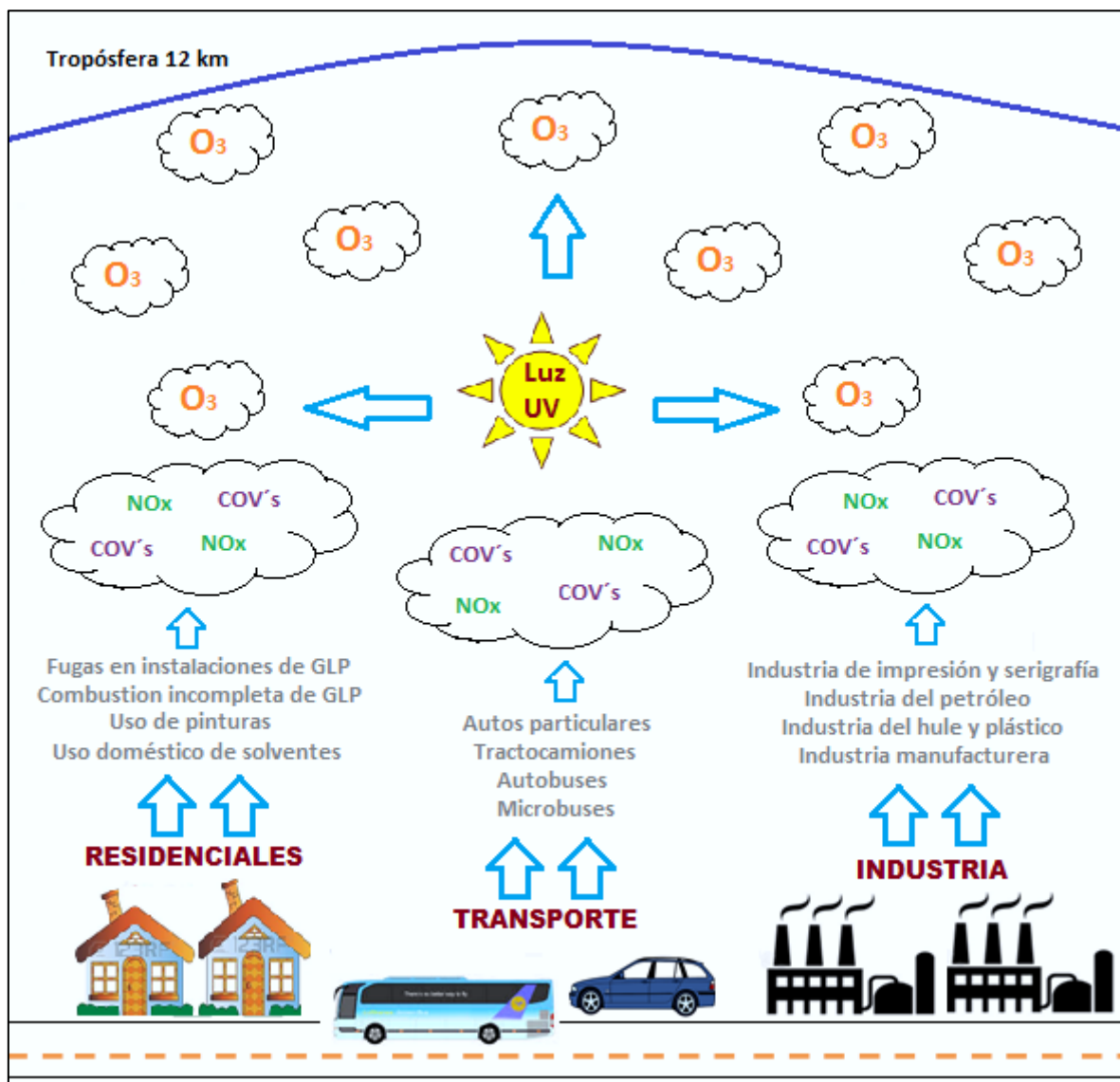


Figura 1.2 Fuentes de contaminación precursoras de Ozono.

El Ozono es un contaminante tóxico que afecta principalmente el aparato respiratorio. Debido a su pequeña capacidad de disolución, el Ozono penetra en las vías respiratorias e irrita las mucosas y los tejidos pulmonares. Además

provoca hiperreactividad del aparato respiratorio, broncoconstricción y disminución de la actividad de los macrófagos alveolares [Gutiérrez, 2001].

La exposición al Ozono se asocia con una gran variedad de efectos negativos a la salud humana, los cuales varía, con la duración y volumen de aire que se inhale durante la exposición [Huerta, 2013]. En la Tabla 1.2 se describen los efectos sobre la salud humana, de acuerdo al nivel de la calidad del aire basado en el IMECA (Índice Metropolitano de la Calidad del Aire).

**Tabla 1.2** Efectos sobre la salud humana por Ozono, conforme el IMECA.

INTERVALO IMECA	CLASIFICACIÓN	DAÑOS A LA SALUD
0 a 50	SIN RIESGO	NINGUNO
51 a 100	ACEPTABLE	La exposición prolongada al Ozono puede provocar en individuos extraordinariamente sensibles, efectos respiratorios durante el ejercicio físico al aire libre.
101 a 150	DAÑINA A LA SALUD DE LOS GRUPOS SENSIBLES	La población más sensible muestra una reducción promedio en la función pulmonar del 10%. Irritación en los ojos y vías respiratorias, provocando tos, dolor de cabeza, respiración dificultosa e irritación de garganta.
151 a 200	DAÑINA A LA SALUD	Una reducción en la función pulmonar del 30%, resulta más difícil la respiración profunda y vigorosa normal. A este nivel, cualquiera podría experimentar efectos respiratorios.
201 a 300	MUY DAÑINA A LA SALUD	Los miembros de grupos sensibles probablemente experimentarían síntomas respiratorios cada vez más severos y una respiración deteriorada. Así como una reducción pulmonar del 10 al 15% para las personas que realizan ejercicio al aire libre, según la EPA. Las personas con asma presentarán afecciones más severas provocando el aumento de medicamentos o la atención médica en un hospital.

Los efectos probados del Ozono sobre la salud humana son:

Afecta a personas con asma. Cuando los niveles de Ozono son altos, aumenta el número de personas que sufren ataques de asma y requieren atención médica, debido a que el Ozono hace que las personas sean más susceptibles a los alérgenos, los agentes que provocan los ataques de asma [Jaimes y Retama, 2013].

Agudiza enfermedades pulmonares crónicas, como el enfisema y la bronquitis y reduce la capacidad del sistema inmunológico para defender al sistema respiratorio de las infecciones bacterianas.

Causa daño permanente al pulmón. Los pulmones en desarrollo de los niños pueden presentar una función pulmonar reducida en la edad adulta por el daño repetido a corto plazo por Ozono. En los adultos, la exposición al Ozono puede acelerar la disminución natural de la función pulmonar que ocurre como parte del proceso normal de envejecimiento [Rodríguez y Tenorio, 2006].

Con el fin de proteger la salud de la población expuesta a los efectos adversos por Ozono mencionados anteriormente, se ha normado su valor límite permisible en el aire, donde es aplicable la norma NOM-020-SSA1-2014, que establece: “ Dos valores límite para las concentraciones ambientales del O<sub>3</sub>, para efecto de la protección a la salud de la población más susceptible: 1) La concentración de O<sub>3</sub> debe ser menor o igual a 0.095 ppm (95 ppb) como promedio horario, el cual nunca deberá ser rebasado y, 2) La concentración del promedio móvil de 8 horas de O<sub>3</sub>, debe ser menor o igual a 0.070 ppm (70 ppb), tomado como el máximo en un periodo de 1 año ”.

El Ozono también causa daños a las plantas, que ocurren por lo general en la estructura de la hoja. Investigaciones realizadas en Estados Unidos demostraron que el tabaco y el pino blanco se ven afectados por lesiones de Ozono, cuando su

concentración alcanza  $2150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ . Se ha demostrado que la exposición al Ozono reduce la fotosíntesis, probablemente como resultado del daño de los cloroplastos; también aumenta la respiración y la permeabilidad de las paredes celulares inferiores. En actividades agrícolas puede provocar una disminución importante en el rendimiento de los cultivos [García-Colín y Varela, 2001].

Los efectos dañinos en los animales por Ozono, exponiéndose a concentraciones de  $108$  a  $430 \mu\text{g}/\text{m}^3$  puede aumentar la mortalidad de animales con infecciones respiratorias y causar la irritación de la mucosa de las vías respiratorias, mientras que concentraciones de  $1290$  a  $1720 \mu\text{g}/\text{m}^3$  ( $0.6$  a  $0.8$  ppm) provocan sofocación y tos [Jacobson, 2002].

En cuanto a los materiales, el Ozono ataca el hule sintético con lo que se reduce la vida de llantas, el aislamiento de hule, también ataca la celulosa de los textiles y a las pinturas [Colín, 2001]. En la Tabla 1.3 se aprecian algunos de los efectos del Ozono en el medio ambiente.

**Tabla 1.3** Efectos del Ozono en el medio ambiente.

Efectos en		Concentración (ppm)	Exposición	Daños
Vegetación	Frijoles pintos Tomates Pinos blancos	0.01	1 a 8 horas	Susceptibles a lesiones por Ozono
	Espinacas Alfalfa	0.06 ppm	3 o 4 horas	
Animales		0.05 a 0.2 ppm		Puede aumentar la mortalidad en animales con infecciones respiratorias, causar la irritación de la mucosa de las vías respiratorias
		0.6 a 0.8 ppm		Provoca sofocación y tos
Materiales	Hule	0.02 ppm	1 hora	Endurecimiento y ruptura del plástico (plástico natural vulcanizado)
	Textiles			Ataca celulosa de textiles, reduciendo la resistencia de estos

## **1.5 Comportamiento del Ozono en la Zona Metropolitana del Valle de México**

Para comprender el impacto de la contaminación por Ozono en la atmósfera de la ZMVM, es necesario analizar su tendencia tanto en concentración como en puntos IMECA, debido a que la calidad del aire por este contaminante, depende en gran medida de la generación de emisiones y concentraciones de sus precursores. En la Figura 1.3 se muestran las concentraciones anuales. Se observa que para los años de 1986 a 1995 la concentración de Ozono alcanzó las 400 ppb. Para los siguientes 10 años, es decir, de 1996 hasta 2005, se observó una disminución, registrando máximos de 320 ppb. Para los años de 2006 a 2009, se observa un leve decremento de la concentración de Ozono de 200 ppb a 190 ppb. De 2010 a 2016, no se registraron concentraciones superiores a 200 ppb.

En general, se observa una disminución de la concentración a lo largo de 1986 hasta 2014, sin embargo a pesar de esta disminución, el valor límite permisible establecido en la NOM-020-SSA1-2014 fue rebasado durante estos años, es decir, no existió algún año en el que se haya cumplido con el valor límite de Ozono.

Otra forma de analizar el comportamiento del Ozono es a través del IMECA. El IMECA es un indicador diseñado para informar a la población sobre el estado de la calidad del aire, muestra que tan contaminado se encuentra el aire y cuáles podrían ser los efectos en la salud (Tabla 1.2). Desde 2006, el índice de calidad del aire tiene su fundamento en la Norma Ambiental del Distrito Federal NADF-009-AIRE-2006 en donde se establecen los requisitos para su cálculo y difusión [SIMAT, 2016].

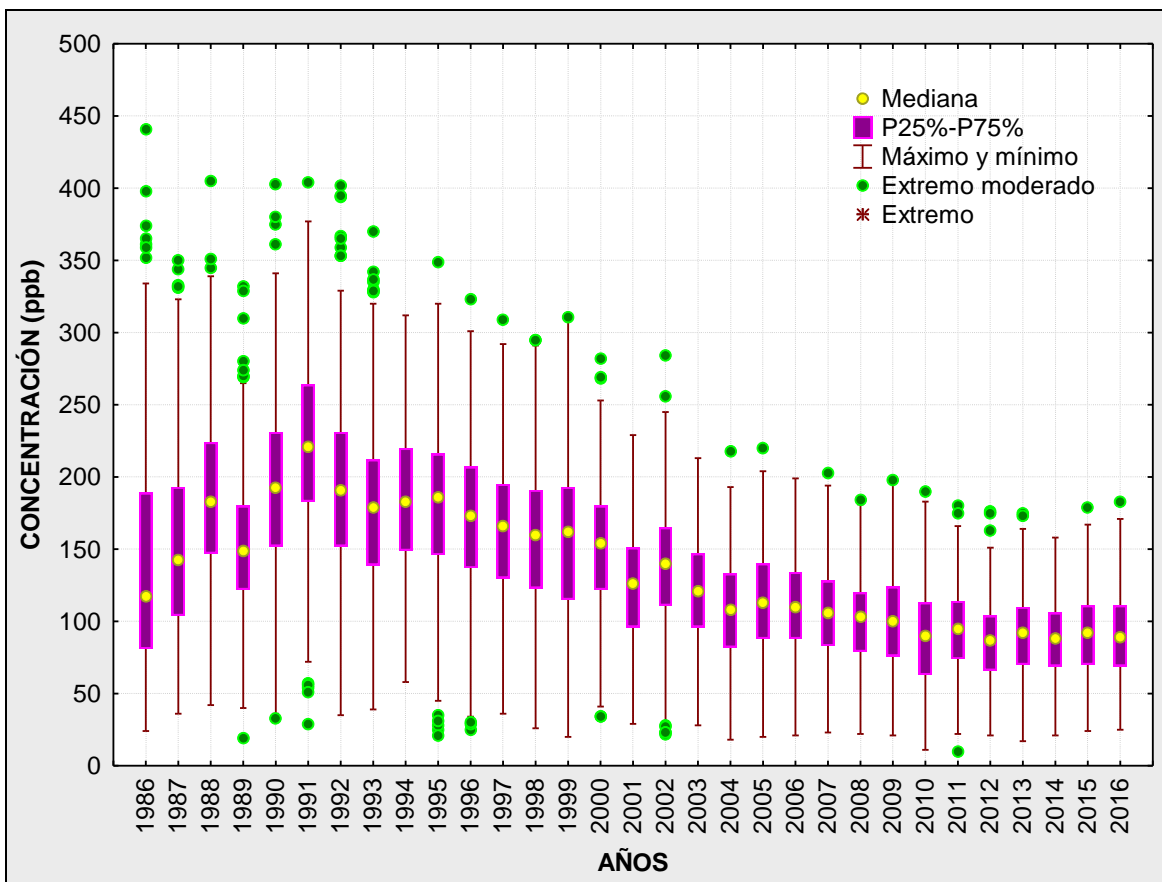


Figura 1.3 Tendencia de la concentración de Ozono en la ZMVM de los años de 1986 al 2016.

En la Figura 1.4 se muestra la clasificación de la calidad del aire por Ozono, basado en puntos IMECA, de 1992 a 2014. Se presentan el número de días por año que tuvieron una calidad del aire buena (0-50 IMECA), regular (51-100), mala (101-150), muy mala (151-200) o extremadamente mala (201-300) por Ozono.

Como se observa, la tendencia general es un decremento en los días con calidad del aire extremadamente mala, los cuales ya no se han presentado desde el 2003. Los días con calidad muy mala también descendieron hasta el año 2014, sin embargo en el 2015 y 2016 nuevamente apareció esta categoría de calidad del aire, activándose la contingencia ambiental en estos dos últimos años.

Hasta el 2014, se aprecia un incremento en el número de días con calidad del aire regular, e incluso el número para días “malos” también muestra una ligera

elevación, mientras que los días “buenos” aún siguen siendo los de menor proporción. En contraste, los dos últimos años (2015 y 2016), presentaron un incremento en los días con calidad de aire mala, los días con calidad regular disminuyeron y los días “buenos” incrementaron, sin embargo, a pesar de este escenario se activó la contingencia ambiental. Cabe mencionar que la norma para Ozono indica que la concentración de este compuesto no debe rebasar 0.95 ppb (86 IMECA). En resumen, la Figura 1.4 demuestra la magnitud del problema de contaminación por Ozono en la ZMVM.

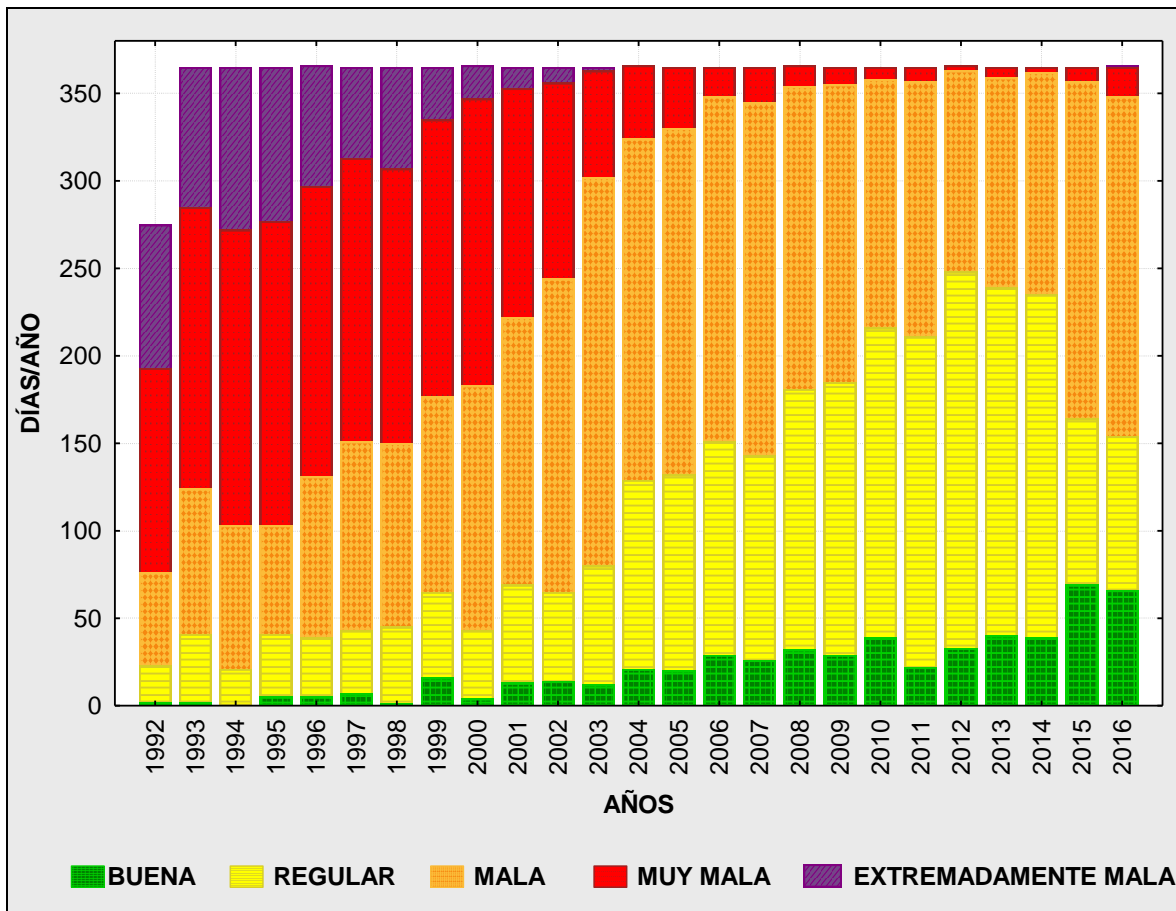


Figura 1.4 Tendencia del IMECA por Ozono en la ZMVM de los años de 1992 al 2016.



## Capítulo 2

### *Compuestos Orgánicos Volátiles*

Los Compuestos Orgánicos Volátiles (COV´s) representan un grave problema de contaminación atmosférica debido a su participación activa en la formación de Ozono troposférico. Más aún, debido a sus propiedades mutagénicas, carcinogénicas y teratogénicas, la mayoría de ellos son considerados como contaminantes tóxicos y muy dañinos a la salud humana [IE, 2010].

En este Capítulo se hace una revisión de los diferentes trabajos sobre COV´s por el Instituto Mexicano del Petróleo durante los años 2003 a 2006 con la Campaña Milagro. Asimismo se revisan los Inventarios de Emisiones, enfatizando las fuentes más importantes de COV´s. Finalmente se describen los trabajos en los que se ha calculado la reactividad fotoquímica de diversos COV´s, y su capacidad para producir Ozono.

#### **2.1 Definición de Compuestos Orgánicos Volátiles**

Como consecuencia de las diversas actividades comerciales, industriales y domésticas que se desarrollan diariamente en la ZMVM, constantemente se emiten a la atmósfera una gran cantidad y variedad de COV´s.

Pero... ¿qué son los COV´s?

- En el Title I de la Clean Air Amendment se define a los COV´s como cualquier compuesto que se encuentre en fase gas y contenga carbono, con exclusión de monóxido de carbono, dióxido de carbono, ácido carbónico, carburos metálicos o carbonatos, y carbonato de amonio, que participa en reacciones fotoquímicas atmosféricas [EPA, 2016].

- La U. S. Environment al Protection Agency, define a los COV´s como compuestos orgánicos que tienen una presión de vapor superior a 0.1 milímetros de mercurio (mm Hg) en condiciones estándar, es decir, a 20 °C y 760 mm Hg [EPA, 2016].
- En conjunto, las sustancias que se evaporan fácilmente, incluidos los hidrocarburos y sus derivados se denominan Compuestos Orgánicos Volátiles [Colín, 2001].

Todas las definiciones aquí descritas, conciernen diferentes especies de COV´s y se han identificado como reactivos que contribuyen de una manera muy importante en la producción de Ozono, teniendo efectos adversos para la salud a corto y largo plazo.

### **2.1.1 Clasificación de Compuestos Orgánicos Volátiles**

Los COV´s son especies químicas gaseosas de 2 a 20 átomos de carbono, y conforme a su peso molecular, se clasifican en ligeros y pesados; los ligeros contienen de 2 a 11 átomos y los pesados de 12 a 20 átomos de carbono. Según su estructura molecular, los alcanos poseen enlaces sencillos C-C, los alquenos doble enlace C=C, alquinos triple enlace C≡C, los aromáticos poseen un anillo bencénico, y los halogenados contienen un halógeno en su estructura [Sánchez, 2004], como se muestra en la Tabla 2.1.

**Tabla 2.1** Clasificación de Compuestos Orgánicos Volátiles en función de su peso molecular y estructura molecular.

Función	Criterio	Descripción
Peso molecular	Ligeros	2 a 11 átomos de carbono
	Pesados	12 a 20 átomos de carbono
Estructura molecular	Alcanos	Enlace sencillo
	Alquenos	Doble enlace
	Alquinos	Triple enlace
	Aromáticos	Anillo bencénico
	Halogenados	Halógeno

De la misma manera, la U.S. EPA ha clasificado a los COV's en función de su volatilidad como se muestra en la Tabla 2.2.

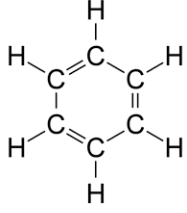
**Tabla 2.2** Clasificación de Compuestos Orgánicos Volátiles en función de su volatilidad (Criterio U.S. EPA).

Clase (COV's)	Presión de vapor (mmHg)	Punto de ebullición (°C)
Volátiles	> 0.075	< 100
Semi-volátiles	$\approx 1.33 \times 10^{-3}$	100 – 325
No Volátiles	< $1.33 \times 10^{-3}$	> 325

### **2.1.2 Presencia de Compuestos Orgánicos Volátiles en la atmósfera de la Zona Metropolitana del Valle de México**

De acuerdo al Inventario de Emisiones de Contaminantes Criterio 2010 [IECC, 2010], en mediciones de COV's realizadas en la atmósfera de la ZMVM se detectó la presencia de compuestos pertenecientes a las familias químicas de los alcanos (parafinas), de los alquenos (olefinas) y de los compuestos aromáticos, con una mayor abundancia de alcanos. Además, también se han encontrado mezcla de alquinos, compuestos halogenados y especies oxigenadas. Asimismo, en el Inventario de Emisiones de Contaminantes Tóxicos 2010 [IECT, 2010], entre los principales grupos químicos encontrados en la atmósfera de la ZMVM, se reportaron parafinas, olefinas, aromáticos y acetileno.

**Tabla 2.3** Características de los COV's presentes en la atmósfera ZMVM [Granados, et al. 2010].

Compuesto	Características	Ejemplo
<b>Alcanos o parafinas</b>	Poseen enlaces sencillos entre cada átomo de carbono. Presentan una menor reactividad debido a la estabilidad del enlace carbono, en comparación con otros hidrocarburos.	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ <p><b>Etano</b></p>
<b>Alquenos u olefinas</b>	Su estructura presenta doble enlace entre dos átomos vecinos de carbono, son relativamente estables, pero más reactivos que los alcanos debido a la presencia del doble enlace.	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{C}=\text{C} \\   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ <p><b>Eteno</b></p>
<b>Alquinos</b>	Presentan una ligadura triple entre al menos dos átomos vecinos de carbono, lo cual los hace inestables y muy reactivos, en comparación de otros alcanos y alquinos.	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ <p><b>Acetileno</b></p>
<b>Aromáticos</b>	Hidrocarburos que tienen propiedades químicas tipificadas por el benceno, que es su estructura anular y su cohesión interna mediante una nube de electrones. En la atmósfera presentan reactividad intermedia entre los alcanos y los alquenos durante la formación del Ozono.	 <p><b>Benceno</b></p>
<b>Carbonilos</b>	Es un grupo funcional que consiste en un átomo de carbono con un doble enlace a un átomo de oxígeno. Estos compuestos tienen reactividad comparable a las olefinas.	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \end{array}$ <p><b>Formaldehído</b></p>

Ambos inventarios coinciden en que las especies de COV's precursoras de Ozono con mayor presencia en la atmósfera de la ZMVM son las parafinas, olefinas, acetileno, aromáticos como el benceno y carbonilos como el formaldehído. En la Tabla 2.3 se describen algunas características de estos grupos químicos.

## 2.2 Mediciones de Compuestos Orgánicos Volátiles en la Zona Metropolitana del Valle de México.

En México, las primeras mediciones de COV's fueron realizados en 1991 por el Instituto Nacional de Ecología y el Instituto Mexicano del Petróleo. En particular,

para la ZMVM existen estudios con mediciones de estos compuestos desde 1999 continuando con las campañas de medición llamadas MIT-MCMA, 2002-2003 y Milagro, 2006 [ICT, 2010]. Asimismo, la Secretaría del Medio Ambiente del Gobierno del Distrito Federal (SMA-GDF) y el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC) llevaron a cabo un estudio denominado “Monitoreo y evaluación de las concentraciones de Compuestos Orgánicos Volátiles en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México”, para los años de 2005 a 2006 (SMA-GDF). Actualmente la Dirección de Monitoreo Atmosférico de la Ciudad de México está realizando campañas de medición de COV´s en la ZMVM con duración permanente a partir del año 2014 [SIMAT, 2016]. A continuación en la Tabla 2.4 se describen algunas de las concentraciones más importantes de dichos trabajos.

**Tabla 2.4** Resumen de algunas mediciones de COV´s en la ZMVM.

Trabajos	Resultados destacados
<p><b>Campaña Milagro 2003-2006</b> [MCE, 2016]</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Durante la mañana en un horario de 06:00 a 09:00 las concentraciones de los COV´s promediaron aproximadamente 1.5 ppmC (partes por millón de Carbono).</li> <li>•La composición de los COV´s fue 60% de alcanos, 15% de aromáticos, y 5% de olefinas.</li> <li>•Las emisiones vehiculares fueron la fuente principal de emisión de COV´s, en particular de olefinas y aromáticos.</li> <li>•Niveles elevados de compuestos orgánicos volátiles tóxicos, incluyeron: formaldehído, acetaldehído, 1,3-butadieno y los compuestos BTEX (benceno, tolueno, etilbenceno y xileno).</li> </ul>
<p><b>“Monitoreo y evaluación de las concentraciones de Compuestos Orgánicos Volátiles en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México”</b> <b>2005-2006</b> [SMA-GDF, INE-DGCENICA y UAMI, 2008]</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•El grupo de los alcanos constituyó el 54% de los COV´s analizados, seguido por los aromáticos 26% y los alquenos 18%.</li> <li>•Las especies relacionadas con fuentes vehiculares, disolventes y con el gas LP son la causa principal de la formación de Ozono en la ZMVM.</li> <li>•Como compuestos tóxicos entre las especies cuantificadas se consideraron: elisopropilbenceno, el estireno, los xilenos, el etilbenceno, el tolueno, el benceno, el 2,2,4-trimetilpentano y el hexano. De estas especies se encontraron en mayor proporción el tolueno con una concentración entre 29.8 - 58.8 ppbC (partes por billón de Carbono), la mezcla de xilenos con 20.9 ppbC, el benceno se encontró entre 7.1 y 12.7 ppbC y el hexano con concentraciones entre 14.2 y 29.4 ppbC.</li> </ul>
<p><b>Monitoreo de Precursores de Ozono</b> [SIMAT, 2016]</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•La Dirección de Monitoreo Atmosférico realizará la medición de alrededor de 50 hidrocarburos precursores de Ozono en la ZMVM, el proyecto está en proceso y tiene una duración permanente a partir del 2014.</li> </ul>

## ***Inventarios de Emisiones***

Las emisiones de COV´s provienen de diversas fuentes relacionadas principalmente con las actividades que la población realiza cotidianamente. Debido a esto, es necesario estimar en qué cantidad son emitidas y cuáles son las fuentes

con mayor emisión de este tipo de compuestos; esto con la finalidad de controlar este tipo de fuentes y disminuir las emisiones de los COV´s y a su vez reducir la contaminación por Ozono. Los inventarios clasifican las emisiones por tipo de fuente, que pueden ser, fuentes puntuales, de área, móviles y naturales. En la Tabla 2.5, se enlistan los inventarios de emisiones de COV´s, desde el año de 1998 hasta el año 2010 en la ZMVM, y los resultados más destacados en cada inventario.

**Tabla 2.5** Fuentes de COV´s en la ZMVM de acuerdo con los IE.

Inventarios de emisiones	Resultados más destacados
GDF-IE 1998	<ul style="list-style-type: none"> <li>•En la ZMVM se emiten alrededor de 2.5 millones de toneladas decontaminantes criterio, entre ellos el 40% son hidrocarburos.</li> <li>•Se emiten más de 247 mil toneladas de hidrocarburos, de los cuales por la actividad de los autos particulares y por el uso de disolventes se emiten más del 33%.</li> </ul>
GDF-IE 2000	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Los compuestos orgánicos totales son el principal contaminante en fuentes de área; debido a la distribución y almacenamiento de gas LP, fugas de gas LP y los hidrocarburos no quemados de gas LP, servicio de gas LP para carburación, y el uso de disolventes.</li> </ul>
GDF-IE 2002	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Los autos particulares emitieron el 18% del total de COV (224,656 ton/año), sin embargo, en conjunto, las fuentes de área representaron el 48%, siendo el uso comercial y doméstico de disolventes, así como los hidrocarburos no quemados de GLP los principales emisores (12% y 8% respectivamente).</li> </ul>
GDF-IE 2004	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Se estimaron 532,168 toneladas anuales de COV´s, donde las fuentes de área y móviles son las que generaron las mayores emisiones, con 41% y 35% respectivamente.</li> <li>•Entre los sectores más contaminantes se tiene a las fuentes puntuales y a los autos particulares, lo cual representó el 21% y 16% del total respectivamente; también se puede mencionar al consumo de disolventes y a los hidrocarburos no quemados de la combustión de gas LP, los que en conjunto generaron el 17%.</li> </ul>
GDF-IE 2006	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Aún cuando las fuentes móviles tienen una importante contribución de compuestos orgánicos volátiles (35% de COV´s), las fuentes de área son las más importantes con el 43% del total; entre sus categorías se pueden mencionar: el uso comercial y doméstico de disolventes, las fugas en instalaciones de gas L.P. y la combustión incompleta de gas L.P.</li> <li>•Los COV´s, los generan con más abundancia las fuentes emisoras que se encuentran a cargo del Gobierno del Estado de México, aportan el 49% de los COV´s que se generan en la ZMVM, destacando las emisiones de los vehículos particulares y la del transporte de pasajeros.</li> </ul>
GDF-IE 2008	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Las fuentes móviles tienen una importante contribución de COV´s (31% de COV´s), pero las fuentes de área son las más importantes, contribuyendo con el 41% del total, en estas fuentes las categorías más contaminantes que se pueden mencionar son: el uso comercial y doméstico de disolventes, las fugas en instalaciones domésticas y la combustión incompleta de gas L.P.</li> <li>•En las fuentes contaminantes de jurisdicción del Gobierno del Estado de México, es notable la emisión de Compuestos Orgánicos Totales (COT) generada por el relleno sanitario ubicado en el Estado de México.</li> </ul>
GDF-IE 2010	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Las fuentes de área aportan el 39% del total de las emisiones de COV´s; que están asociadas principalmente al uso de disolventes, fugas en instalaciones domésticas, así como a la combustión incompleta de gas LP.</li> <li>•Los vehículos automotores generan una cantidad importante de precursores de Ozono (NOx y COV´s).</li> <li>•En cuanto a las emisiones de COT, cabe mencionar que incluyen cantidades importantes de metano que son generadas en el relleno sanitario Bordo Poniente.</li> </ul>

Los compuestos tóxicos son estimados en un inventario especial, desde el año 2004 al 2010. En la Tabla 2.6 se presentan algunas de las aportaciones más importantes de estos inventarios.

**Tabla 2.6** Fuentes de COV's tóxicos en la ZMVM de acuerdo con los Inventarios de Contaminantes Tóxicos.

Inventarios de emisiones	Fuentes de emisión de COV's tóxicos en la ZMVM
<b>GDF-ICT 2004</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•En las fuentes móviles, los contaminantes tóxicos de mayor importancia son el tolueno, el MTBE, el xileno, el benceno, el 2,2,4 trimetil pentano y el formaldehído, estos 6 compuestos en conjunto aportan 86% de las emisiones de contaminantes tóxicos provenientes de estas fuentes.</li> <li>•En el caso de las fuentes de área, al igual que en las fuentes fijas, el contaminante de mayor importancia es el tolueno, del cual se emiten más de 11,700 toneladas anuales a la atmósfera, seguido del 1,1,1-tricloetano con 7,388 toneladas y el tricloetileno con 5,857 toneladas, estos tres contaminantes aportan aproximadamente un 47% de las emisiones de contaminantes tóxicos generados por dichas fuentes.</li> </ul>
<b>GDF-ICT 2006</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•El contaminante de mayor importancia generado por las fuentes puntuales es el tolueno, del cual se emiten 15,626 toneladas anuales y es usado en la fabricación de pinturas y sus diluyentes, barniz para uñas, lacas, adhesivos y gomas, y en ciertos procesos de imprenta y curtido de cuero.</li> </ul>
<b>GDF-ICT 2008</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•En las emisiones anuales de contaminantes tóxicos de la ZMVM, las fuentes de área aportan la mayor cantidad de contaminantes tóxicos (56%), seguidas de las fuentes móviles y las fuentes puntuales con el 27% y 13% respectivamente.</li> </ul>
<b>GDF-ICT 2010</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Las emisiones de contaminantes tóxicos estimadas de las fuentes puntuales ascienden a 27,884 toneladas al año.</li> <li>•El contaminante de mayor abundancia que genera este sector es el tolueno.</li> </ul>

### 2.3 Reactividad Fotoquímica de los COV's.

Cientos de COV's se liberan en la atmósfera y cada compuesto presenta un comportamiento químico diferente, dependiendo principalmente de su reactividad. Esta es una propiedad importante que debe tomarse en cuenta en el desarrollo de estrategias de calidad del aire enfocadas en la reducción de emisiones de los COV's más reactivos, ya que son estos compuestos los que generan contaminantes aún más peligrosos, como el Ozono.

Cada uno de los COV's reacciona de diferente forma en la atmósfera. Por ejemplo, el etano reacciona lentamente y por ello su participación es pequeña en la cadena de reacciones fotoquímicas que generan Ozono.

El propileno, es altamente reactivo y, a diferencia del etano, participa activamente en la fotoquímica atmosférica.

## Rutas químicas individuales

La degradación fotoquímica de la mayoría de los COV's se inicia por la reacción con los radicales  $\bullet\text{OH}$  y siguen diferentes rutas químicas como puede observarse en la Figura 2.1. Al momento de que los COV's son emitidos a la atmósfera, estos pueden reaccionar principalmente en 3 etapas: Reacciones de iniciación, Reacciones intermedias, de finalización donde se generan compuestos estables. Sin embargo algunos productos pueden volver a reaccionar con los COV's emitidos o generados en la atmósfera, iniciando el ciclo de reacciones. En la Figura 2.1 se aprecian las rutas químicas de los COV's al ser emitidos: Reacción de iniciación para los Carbonilos  $\bullet\text{ROOH}$ ,  $\bullet\text{RC(O)OOH}$ , y  $\bullet\text{RONO}_2$ , principalmente de fotólisis; todos los COV's y productos oxigenados reaccionan con el radical  $\bullet\text{OH}$ ; con el  $\text{NO}_3$  reaccionan los alcanos, dienos, aldehídos y éteres mientras que los alcanos, dienos, y productos oxigenados pueden reaccionar con el Ozono.

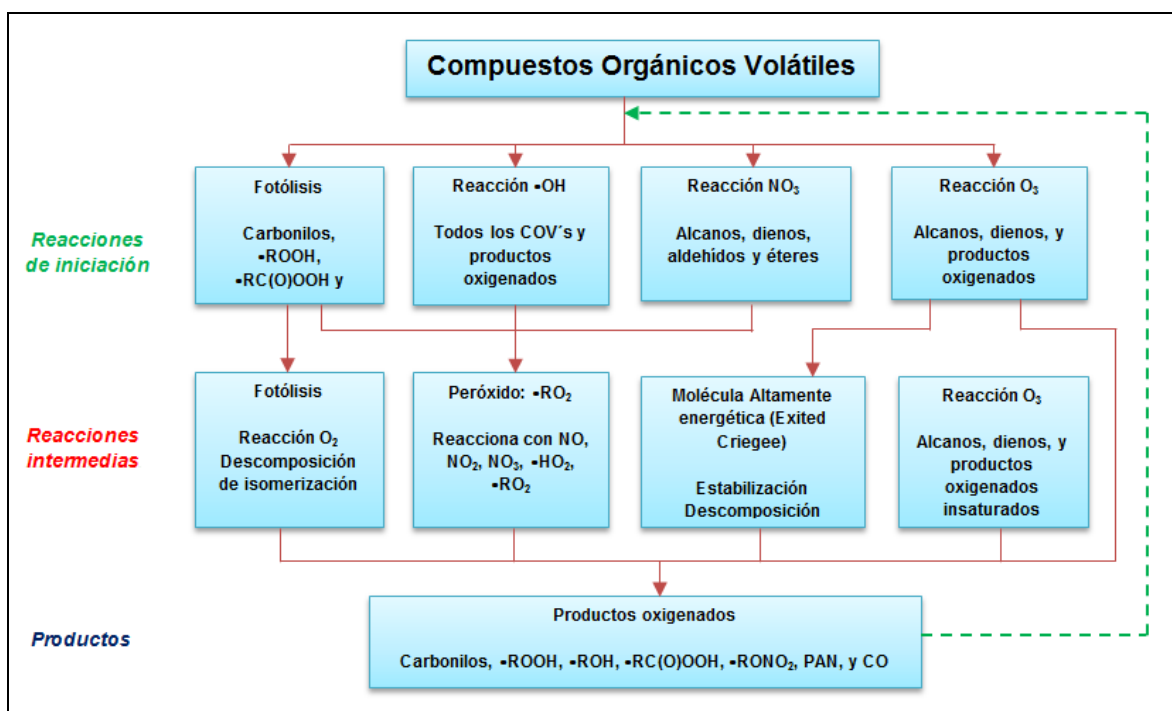


Figura 2.1 Representación esquemática de las rutas químicas atmosféricas de los Compuestos Orgánicos Volátiles [Jenkin, et al. 2008].



### **2.3.1 Escalas y Métodos para el Cálculo de la Reactividad Fotoquímica de los Compuestos Orgánicos Volátiles.**

La contaminación por Ozono u otros oxidantes fotoquímicos secundarios, es un problema severo en numerosas ciudades del mundo. El caso más conocido y estudiado es la ciudad de los Ángeles, California E.U. en donde se desarrolló una Escala de Reactividad Máxima (MIR por sus siglas en inglés). El uso de la MIR en los programas de calidad del aire en esta ciudad ha permitido una investigación y conocimiento profundo de la formación de Ozono.

Posteriormente en Europa se desarrolló un método para estimar la capacidad de formación de Ozono de cada compuesto orgánico, esta es la escala del Potencial de Formación de Ozono (POCP por sus siglas en inglés) desarrollada por R. G. Derwent para problemas ambientales de Ozono en ese lugar. Ambas escalas se describen a continuación.

#### **Escala de Reactividad Máxima Incremental (MIR)-Carter 1994**

La Escala de Reactividad Máxima Incremental (MIR, 1994) fue desarrollada por William P.L. Carter, para el cálculo de los efectos de los mecanismos fotoquímicos de las reacciones de COV's en la atmósfera, en diversas áreas urbanas del estado de California. Carter, define la reactividad incremental de un compuesto orgánico volátil como el número de gramos adicionales de Ozono formados por gramo de COV's [Carter, 1994], como se describe en la ecuación (10):

$$IR_i = \frac{\Delta O_3}{\Delta COV_i} \quad \dots(10)$$

Donde  $IR$  es la reactividad incremental de un compuesto orgánico  $i$  que depende en gran medida de las condiciones ambientales, especialmente de la

disponibilidad de  $\text{NO}_x$ ;  $\Delta O_3$  es el incremento de Ozono formado, tomando como referencia un escenario base; y  $\Delta \text{COV}_i$  representa el incremento de la emisión del compuesto orgánico.

### ***Potencial de Formación de Ozono (POCP)***

El Potencial de Formación de Ozono (POCP, 1996) desarrollado por R. G. Derwent, se derivó de los modelos de trayectoria fotoquímicos usados para describir la producción de Ozono.

El POCP para un hidrocarburo en particular fue calculado experimentalmente a partir de un escenario base y cambiando la emisión de los compuestos orgánicos en cada escenario. La elección de la magnitud de la emisión del hidrocarburo fue totalmente arbitraria. Este aumento de las emisiones de hidrocarburos incrementó la formación de Ozono adicional en relación al escenario base. El método toma como compuesto orgánico de referencia al etileno (eteno). El POCP de un hidrocarburo en particular  $i$  [Derwent, 1996], se define por la siguiente ecuación:

$$POCP_i = \frac{\text{incremento de Ozono con el hidrocarburo } i}{\text{incremento de Ozono con eteno}} * 100 \quad \dots(11)$$

Las escalas se distinguen básicamente en que la MIR se determina en cámaras de experimentos, evaluando la respuesta inmediata en Ozono a causa de una adición de un COV específico, mientras que el POCP se obtiene a través de un modelo químico, ajustándolo a observaciones reales durante varios días. Por lo anterior, la escala MIR tiende a reflejar la fotoquímica a corto plazo, mientras que la escala POCP considera la reactividad a lo largo de varios días.

La Tabla 2.7 contiene los valores reportados de POCP para varios COV's, comparados con el valor de la MIR. En general se observaron las mismas

tendencias, es decir, los compuestos con alto valor de MIR también muestran alto POCP. El desarrollo de estas escalas (MIR y POCP) ha permitido conocer la reactividad de los COV´s y su contribución a la formación del Ozono; así como el desarrollo e implementación de estrategias de control de las emisiones de COV´s. Un ejemplo es en el estado de California E.U. donde se usó la información de la reactividad en los programas de baja emisión vehicular y de combustibles limpios, cuya finalidad fue ajustar y regular la cantidad de emisiones producidas por los automotores y a su vez, conocer el efecto de los programas ambientales de mitigación de Ozono y mejora de la calidad del aire en las zonas urbanas con altas emisiones de COV´s de diversas fuentes.

**Tabla 2.7** Comparación de diferentes escalas de reactividad para algunos Compuestos Orgánicos Volátiles [Derwent, 1998].

COV´s	MIR	POCP
Metano	0	3
Etano	3	14
Propano	6	41
n-butano	12	60
i-butano	15	42
n-pentano	13	62
n-hexano	13	65
Ciclohexano		60
Etileno	100	100
Isopreno	145	118
Benceno	5	33
Tolueno	35	77
o-xileno	91	83
m-xileno	123	109
p-xileno	95	95
Metanol	7	21
Etanol	15	45
i-propanol	8	22
Butanol	34	63
Formaldehido	127	55
Acetaldehído	77	65
Acetona	7	18
Metiletilcetona	15	51
Ácido fórmico		0
Ácido acético		16
Dimetil éter	11	26
Metil-t-butil-éter	8	27

## *Capítulo 3*

### *Metodología para el tratamiento de datos*

En este capítulo se explica el método aplicado para cumplir con los objetivos de este trabajo de tesis, desde el arreglo de la base de datos, los análisis estadísticos, y de la información del potencial de generación de Ozono para las fuentes/procesos identificados en la ZMVM.

#### **3.1 Lugar de estudio**

El lugar de estudio es la ZMVM, ubicada en las coordenadas geográficas 19° 03' - 19° 54' de latitud Norte y 98° 38' - 99° 31' de longitud Oeste [IE,2006].

En esta zona están ubicadas 4 estaciones de monitoreo operadas por el Gobierno de la ZMVM y que pertenecen al Sistema de Monitoreo Atmosférico (SIMAT): Tlalnepantla (TLA), Xalostoc (XAL), Merced (MER) y Pedregal (PED), que abarcan las zonas norte, centro y sur de la ZMVM, como se muestra en la Figura 3.1.

#### **3.2 Fuente de datos**

Los datos de concentración total y especiación química de COV's (partes por billón de Carbono, ppbC), fueron proporcionados por el Instituto Mexicano del Petróleo (IMP) para los sitios de XAL, PED, MER, medidos durante las fechas del 17 de febrero de 2002 al 02 de mayo de 2003.

Otra parte de la información provino del Gobierno del Distrito Federal (GDF) para los sitios TLA, MER y PED durante las fechas del 23 de septiembre de 2005 al 26 de septiembre de 2006.

Un ejemplo de las bases de datos proporcionadas por ambas instituciones se muestran en la Tabla 3.1 y en la Tabla 3.2.

La información complementaria de este estudio, esto es, las concentraciones de Ozono, óxidos de nitrógeno, dióxido de nitrógeno y los valores de parámetros meteorológicos (temperatura, velocidad de los vientos y dirección de los vientos) fue obtenida del SIMAT para los sitios/fechas específicos en correspondencia con la información de concentración de COV's. En la Tabla 3.3 se enlistan las variables proporcionadas por el IMP y por el GDF, unidades de medición, métodos de cuantificación y fechas de muestreo.



**Figura 3.1** Mapa de la ZMVM mostrando la ubicación de las estaciones del Sistema de Monitoreo Atmosférico utilizadas en este trabajo.

Tabla 3.1 Segmento de la Base de datos de concentración de COV's del IMP (2002 y 2003).

	Xalostoc	Xalostoc	Xalostoc	Pedregal	Pedregal	Pedregal	LA MERCED	LA MERCED	LA MERCED
	2002	2002	2002	2002	2002	2002	2003	2003	2003
	WSU	WSU	WSU	WSU	WSU	WSU	WSU	WSU	WSU
	12/02/2002	12/02/2002	12/02/2002	17-Feb	17-Feb	17-Feb	19-abr	19-abr	20-abr
	grab-12	grab-15	grab-18	grab-00	grab-06	grab-09	grab-07	grab-08	grab-06
	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC
etileno							29.37	86.04	15.29
propileno	15.50	10.51	12.55	6.64	10.65	5.19	18.10	24.17	12.40
i-buteno	15.51	8.43	21.70	3.58	2.77	3.33	15.18	23.32	10.46
1.3-butadieno	1.86	1.76	2.67	0.39	1.15	0.47	2.44	3.48	1.60
t-2-buteno	1.96	2.21	1.84	0.82	2.18	0.42	3.02	5.70	3.19
c-2-buteno	1.71	1.44	1.66	0.59	1.74	0.38	4.14	5.28	2.41
1-penteno	15.56	1.66	22.13	0.55	1.00	0.68	3.16	5.34	1.92
2-metil-1-buteno	1.56	18.85	1.56			0.29	7.87	12.39	4.02
isopreno	0.76	0.68	0.74	0.28	0.85	0.33	1.90	2.93	1.37
t-2-penteno	2.54	2.25	2.27	0.79	1.05	0.36	5.24	5.70	2.90
c-2-penteno	1.24	1.17	1.18	0.32	0.68	0.26	2.40	2.45	1.39
2-metil-2-buteno	1.12	2.37	1.49	3.08	1.42	0.10	5.04	6.35	2.91
1-hexeno	9.15	1.86	1.67	0.25	1.47	0.52			
acetileno							12.64	21.90	6.02
propino	3.08	2.02	2.42	0.38	0.71	1.06			
etano							28.09	22.16	126.74
propano	195.23	136.04	203.91	202.97	335.81	49.62	619.09	513.57	629.50
i-butano	42.93	27.89	38.20	39.15	60.55	29.10	110.77	100.33	112.78
n-butano	87.73	78.17	91.71	99.28	158.68	74.06	306.55	275.75	301.33
i-pentano	88.46	89.39	58.43	26.14	29.89	59.40	121.78	206.33	82.99
n-pentano	22.41	21.48	20.68	7.90	15.73	17.08	53.90	89.40	34.52
2,2-dimetilbutano	2.52	7.72	7.54	15.50	4.19	3.79	8.90	14.71	5.80
ciclopentano							4.13	6.21	2.54
2,3-dimetilbutano	21.25	47.35	19.74	10.30	17.19	19.75	10.17	19.29	4.86
2-metilpentano	25.11	43.94	36.48	2.08	14.55	14.71	35.00	56.82	24.58
3-metilpentano	17.15	32.63	51.07	6.23	8.81	8.28	24.70	38.94	18.32
hexano	17.55	56.61	32.95	4.36	10.93	11.82	27.67	40.97	23.29
metilciclopentano	5.49	11.73	9.42	3.96	0.01	5.42	11.95	17.98	8.72
ciclohexano	12.82	14.06	12.87	3.05	5.91	7.35	5.05	7.42	3.20
2-metilhexano	10.95	12.46	9.70	2.20	4.16	4.93	9.78	16.62	7.48
2,3-dimetilpentano							5.06	7.69	3.67
3-metilhexano	13.01	13.27	13.95	2.38	6.26	7.91	12.21	19.21	8.74
i-octano	28.60	30.63	23.88	7.69	11.29	14.55	31.97	50.29	20.96
n-heptano	10.72	10.73	8.96	1.29	0.04	4.62	7.96	15.16	2.03
metilciclohexano	3.37	6.96	2.59	1.60	2.59	3.11	1.87	7.85	1.89
2,5-dimetilhexano							3.61	6.08	2.71
2,4-dimetilhexano							6.31	9.20	4.27
2,3,4-trimetilpentano	10.86	12.15	9.70	3.15	5.44	5.01	13.77	21.37	8.77
n-octano	6.39	7.27	12.69	2.08	2.87	3.25	4.68	8.26	3.83
nonano							4.10	6.30	4.27
n-decano							4.29	6.43	3.09
2-metilheptano	4.94	5.41	3.98	1.26	2.06	2.18			
1,2,4-trimetilciclohexano	1.04	3.11	2.05	1.39	1.79	1.41			
benceno	17.10	17.84	15.62	5.74	12.16	9.55	16.48	24.56	11.67
tolueno	141.63	392.58	265.90	41.13	57.38	50.08	102.86	139.13	86.10
etilbenceno	13.25	23.33	18.28	5.92	7.13	7.77	10.75	17.60	10.23
m,p-xileno	55.96	81.32	67.36	17.22	21.08	18.87	34.50	59.33	32.76
o-xileno	19.16	32.46	26.24	6.76	8.45	7.61	13.70	22.82	9.60
n-propilbenceno	3.74	6.18	4.96	1.91	1.89	1.97	3.19	5.17	2.75
p-etiltolueno							12.28	14.67	5.10
m-etiltolueno	2.86	6.56	4.55	2.24	1.82	1.63	5.99	9.89	3.04
1,3,5-trimetilbenceno	10.55	13.34	10.20	3.83	3.91	2.79	6.72	7.20	5.22
o-etiltolueno	15.19	10.23	9.23	5.57	5.79	5.81	3.58	5.95	2.96
1,2,4-trimetilbenceno	27.13	30.24	30.98	11.14	0.03	8.98	31.56	31.86	16.47
p-propilbenceno	8.85	18.11	15.38	6.06	5.75	4.47			
MTBE	16.71		12.95				36.91	45.21	22.07
estireno	11.16	24.20	22.38	1.91	2.54	3.52	5.78	6.60	3.96
etil acetato							2.30	2.13	2.72



Tabla 3.2 Segmento de la Base de datos de concentración de COV's del GDF (2005 y 2006).

ARCHIVO	FECHA DE MUESTREO	ESTACIÓN	CANISTER No.	ETANO	ETILENO	PROPANO	ISOBUTANO	PROPILENO	n-BUTANO	ACETILENO
				ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC
CF300007	23-sep-05	MER	73	<0.1	4.8	37.3	<0.1	5.3	22.1	8.9
CF300005	23-sep-05	PED	84	<0.1	4.4	31.7	<0.1	4.0	18.1	7.5
CF300009	23-sep-05	IZT	78	4.5	7.8	31.0	7.0	17.4	14.6	9.0
CF300011	23-sep-05	IZT (D)	69	4.0	4.2	36.7	5.9	13.8	19.5	8.4
CF301015	29-sep-05	MER	98	<0.1	7.5	69.1	<0.1	6.2	28.1	12.8
CF301017	29-sep-05	MER (D)	96	<0.1	7.5	57.5	<0.1	4.5	18.2	9.5
CF300013	29-sep-05	PED	90	<0.1	3.9	32.6	<0.1	3.7	15.7	7.3
CF301019	29-sep-05	IZT	104	<0.1	8.9	77.8	<0.1	6.8	28.9	10.3
CF301023	05-oct-05	MER	93	<0.1	7.4	72.4	<0.1	3.6	23.4	11.3
CF301021	05-oct-05	PED	83	<0.1	9.3	72.2	<0.1	7.1	30.5	10.6
CF301027	05-oct-05	PED (D)	72	7.4	14.0	61.5	8.9	12.6	25.5	12.5
CF301025	05-oct-05	IZT	97	<0.1	7.0	72.6	<0.1	1.6	18.2	11.8
CF304001	11-oct-05	MER	76	9.5	15.2	54.5	7.2	19.8	3.4	10.4
CF301029	11-oct-05	PED	92	<0.1	4.7	58.8	<0.1	5.2	23.6	16.0
CF304003	11-oct-05	IZT	68	<0.1	8.9	66.1	1.7	5.3	19.8	9.8
CF304005	11-oct-05	IZT (D)	67	<0.1	5.6	58.6	1.5	5.1	19.6	8.9
CF304009	17-oct-05	MER	91	2.7	7.2	39.8	6.2	17.6	2.9	8.6
CG031013	17-ene-06	TLA	66	13.0	1.2	71.9	10.5	27.6	6.6	12.4
CG031015	17-ene-06	SAG	82	4.8	3.3	53.5	8.8	21.0	3.0	9.2
CG031017	17-ene-06	SAG (D)	67	11.8	6.2	188.7	21.5	46.9	13.7	8.0
CF020017	17-ene-06	IZT	79	8.0	21.1	91.5	14.6	34.7	9.8	13.4
CG032006	23-ene-06	MER	74	11.9	9.1	200.2	18.1	42.6	3.6	8.7
CG032007	23-ene-06	PED	100	3.7	5.0	40.0	5.5	15.2	2.0	8.6
CG033005	23-ene-06	TLA	72	9.0	10.6	48.0	6.8	18.5	6.0	8.9
CG047001	23-ene-06	SAG	75	10.1	19.8	105.2	15.3	42.5	9.7	20.3
CG031019	23-ene-06	IZT	101	7.7	5.7	105.6	18.8	42.5	12.8	13.1
CG031021	23-ene-06	IZT (D)	80	9.1	6.6	91.3	14.2	33.2	14.3	12.5
	29-ene-06	MER	88							
CG047009	29-ene-06	MER (D)	95	29.8	14.6	232.9	33.4	86.1	7.1	14.3
CG047002	29-ene-06	PED	106	4.3	5.7	38.5	5.5	15.6	2.4	8.7
CG033006	29-ene-06	TLA	87	10.0	10.9	61.9	9.0	23.7	6.5	9.3
CG047003	29-ene-06	SAG	88	6.7	12.3	66.6	10.4	26.1	8.4	10.9
CG031023	29-ene-06	IZT	89	6.6	0.6	78.9	12.1	29.3	10.0	10.2
CG047004	04-feb-06	MER	86	9.5	12.0	55.6	8.6	24.0	5.6	11.6
CG047008	04-feb-06	PED	94	6.8	9.8	57.8	8.1	23.6	3.0	14.0
CG047011	04-feb-06	PED (D)	1	4.8	4.3	28.6	4.5	13.6	2.0	5.4
CG047006	04-feb-06	TLA	78	8.3	9.8	39.0	5.1	15.0	5.1	8.8
CG047005	04-feb-06	SAG	102	5.6	8.7	39.1	5.7	15.9	5.6	7.8
CG047007	04-feb-06	IZT	99	5.6	8.6	48.3	9.0	18.6	3.7	9.9
CG055001	10-feb-06	MER	93	14.6	14.4	63.0	9.0	26.5	7.9	11.8
CG058001	10-feb-06	PED	76	4.5	4.9	31.1	4.1	12.3	1.7	6.6
CG047015	10-feb-06	TLA	65	14.7	17.0	83.9	11.2	33.6	9.1	15.2
CG047013	10-feb-06	TLA (D)	68	16.7	26.3	71.8	10.3	28.5	21.8	14.0
CG058002	10-feb-06	SAG	69	6.6	12.8	60.2	8.7	24.1	9.3	10.0
CG048017	10-feb-06	IZT	70	7.9	15.3	72.5	10.2	28.0	11.3	12.1
CG060003	16-feb-06	MER	66	8.8	10.2	68.9	9.5	27.2	10.3	10.2
CG060002	16-feb-06	PED	67	11.1	12.0	74.4	9.6	28.9	8.4	12.6
CG066002	16-feb-06	TLA	79	12.1	15.6	77.5	10.4	31.4	9.2	13.8
CG066003	16-feb-06	SAG	84	9.5	13.3	71.8	10.3	29.6	11.3	11.2
CG066010	16-feb-06	SAG (D)	103	16.1	26.1	79.8	12.4	31.7	31.7	11.6
CG058003	16-feb-06	IZT	73	9.8	18.3	109.2	14.0	41.2	12.3	13.9
CG060005	22-feb-06	MER	91	7.0	3.0	25.8	3.3	10.1	1.0	5.7
CG060004	22-feb-06	PED	105	13.6	5.1	45.0	5.6	16.4	2.2	8.1
CG060001	22-feb-06	TLA	82	14.1	24.1	71.7	10.9	27.9	28.2	10.3
CG072001	22-feb-06	SAG	83	7.3	10.6	68.2	10.4	28.4	13.6	10.2
CG060006	22-feb-06	IZT	98	8.8	16.1	73.2	9.3	27.2	12.7	10.5
CG060007	22-feb-06	IZT (D)	100	6.5	9.6	72.9	10.6	24.9	5.3	8.7
CG072002	28-feb-06	MER	74	6.6	6.1	38.0	6.2	17.0	2.2	7.4
CG072007	28-feb-06	MER (D)	89	6.7	6.5	36.2	6.3	17.2	2.0	7.3

**Tabla 3.3** Variables de la Base General de Datos de COV's 2002-2006.

Variables	Unidades	Métodos de medición	Fechas de muestreo
COV's	ppbC	Agencia de Protección ambiental de Estados Unidos de América (EPA, por sus siglas en inglés) <b>TO-14</b> Determinación de COV's en aire ambiental usando muestreo en canisters y análisis por cromatografía de gases. <b>TO-15</b> Método para determinar COV's en aire ambiental usando canisters y análisis por GC/MS. <b>TO-17</b> Determinación de COV's en aire ambiental usando muestreo activo en tubos sorbentes.	17 de febrero de 2002 al 02 de mayo de 2003
			23 de septiembre de 2005 al 26 de septiembre de 2006
Ozono	ppm	Fotometría U.V. [NOM-036-SEMARNAT-1993]	Mismas fechas que COV's
NO <sub>2</sub> y NO <sub>x</sub>	ppm	Quimioluminiscencia [NOM-037-SEMARNAT-1993]	
Dirección del viento	grados	Transductor de viento (Potenciómetro)	
Velocidad del viento	m/s	Transductor de viento (Potenciómetro)	
Temperatura	°C	Termómetro ambiental	

### 3.3 Construcción de la Base de Datos de Compuestos Orgánicos Volátiles 2002-2006

La construcción de la Base de Datos General para el análisis de las mediciones de COV's, consistió en la verificación de los valores de concentración, la eliminación de datos negativos o fuera del intervalo posible de concentración. Esto se realizó en el programa Excel. Una vez terminado se fusionaron ambas bases (IMP y GDF) formando así la Base de Datos General de COV's 2002-2006 que permitió realizar los análisis posteriores a 70 compuestos orgánicos en 4 sitios y en diversos horarios del día. Los datos de concentración de Ozono, NO<sub>2</sub> y NO<sub>x</sub> y de variables meteorológicas se ajustaron a las fechas y lugares de muestreo de los COV's, como se muestra en la Tabla 3.4.



Tabla 3.4 Segmento de la Base de Datos General de COV's 2002-2006.

FECHA DE MUESTREO	ESTACIÓN	CONCENTRACIÓN	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC	ppbC
		HORA DE MUESTREO	ETANO	ETILENO	PROPANO	ISOBUTANO	PROPILENO	n-BUTANO
13-feb-02	XAL	12:00			54.12	13.61	19.12	38.49
13-feb-02	XAL	15:00			76.36	16.57	7.72	38.50
17-feb-02	PED	06:00			335.81	60.55	10.65	158.68
17-feb-02	PED	09:00			49.62	29.10	5.19	74.06
17-feb-02	PED	15:00			49.94	11.09	1.10	31.66
17-feb-02	PED	18:00			11.74	23.62	5.77	62.46
19-abr-03	PED	14:00-15:00	2.07	1.47	61.99	1.47	0.83	33.87
19-abr-03	PED	15:00-16:00	4.31	3.63	92.13	2.29	2.21	43.95
19-abr-03	PED	17:00-18:00	1.28	4.00	60.68	2.65	2.72	30.23
19-abr-03	MER	07:00	28.09	29.37	619.09	15.18	18.10	306.55
19-abr-03	MER	08:00	22.16	86.04	513.57	23.32	24.17	275.75
10-nov-05	TLA	06:00-9:00		14.4	314.7	24.6	57.3	322.3
16-nov-05	MER	06:00-9:00	25.0	63.8	444.9	80.1	165.9	49.0
16-nov-05	PED	06:00-9:00	14.5	20.6	150.1	36.6	86.0	15.5
16-nov-05	TLA	06:00-9:00	25.5	6.3	135.2	36.2	79.8	16.3
28-nov-05	MER	06:00-9:00	19.4	22.1	183.0	99.2	72.4	103.7
28-nov-05	PED	06:00-9:00	21.7	13.7	224.4	125.4	113.1	29.9
28-nov-05	TLA	06:00-9:00	27.5	74.7	612.5	101.0	209.2	58.5
04-dic-05	MER	06:00-9:00	25.4	31.4	224.6	135.9	124.2	27.4
03-ene-06	MER	06:00-9:00	43.6	14.7	248.4	47.3	91.0	24.8
03-ene-06	PED	06:00-9:00	10.9	0.4	150.7	29.4	56.4	10.2
03-ene-06	TLA	06:00-9:00	21.7	14.1	188.1	34.5	65.6	21.7
11-ene-06	MER	06:00-9:00						
11-ene-06	PED	06:00-9:00	7.9	1.3	106.7	20.9	40.3	8.2
11-ene-06	TLA	06:00-9:00	20.8	27.1	201.2	38.6	75.0	27.2
17-ene-06	MER	06:00-9:00						
17-ene-06	PED	06:00-9:00	3.0	3.5	41.1	6.6	12.3	3.3
17-ene-06	TLA	06:00-9:00	25.9	2.4	215.8	42.0	82.7	26.3
23-ene-06	MER	06:00-9:00	23.9	18.1	600.5	72.3	127.9	14.6
23-ene-06	PED	06:00-9:00	7.4	9.9	119.9	22.1	45.6	7.9
23-ene-06	TLA	06:00-9:00	18.0	21.1	144.0	27.3	55.5	24.1
29-ene-06	MER	06:00-9:00						
29-ene-06	PED	06:00-9:00	8.5	11.4	115.4	22.0	46.9	9.6
29-ene-06	TLA	06:00-9:00	20.0	21.8	185.7	36.0	71.1	26.2
04-feb-06	MER	06:00-9:00	18.9	24.0	166.8	34.3	72.0	22.6
04-feb-06	PED	06:00-9:00	13.5	19.6	173.4	32.5	70.8	12.1
04-feb-06	TLA	06:00-9:00	16.5	19.6	117.0	20.5	45.0	20.6
10-feb-06	MER	06:00-9:00	29.1	28.8	189.1	36.0	79.6	31.5
10-feb-06	PED	06:00-9:00	9.0	9.8	93.2	16.3	36.8	6.9
10-feb-06	TLA	06:00-9:00	29.4	34.0	251.7	45.0	100.9	36.4
16-feb-06	MER	06:00-9:00	17.5	20.5	206.7	38.1	81.7	41.2
16-feb-06	PED	06:00-9:00	22.3	23.9	223.2	38.4	86.6	33.5
16-feb-06	TLA	06:00-9:00	24.2	31.2	232.4	41.6	94.1	36.7
22-feb-06	MER	06:00-9:00	14.0	5.9	77.5	13.3	30.2	3.9
22-feb-06	PED	06:00-9:00	27.1	10.2	134.9	22.4	49.1	9.0
22-feb-06	TLA	06:00-9:00	28.2	48.2	215.1	43.8	83.7	112.7
28-feb-06	MER	06:00-9:00	13.2	12.2	114.0	24.7	51.1	8.8
28-feb-06	PED	06:00-9:00	10.5	12.7	91.8	17.1	38.9	7.7
28-feb-06	TLA	06:00-9:00	27.8	38.8	228.1	42.4	93.8	33.3
06-mar-06	MER	06:00-9:00	27.0	39.2	160.7	31.0	66.4	46.3
06-mar-06	PED	06:00-9:00	7.2	8.0	82.4	15.0	34.2	7.2
06-mar-06	TLA	06:00-9:00	27.8	33.9	175.0	31.7	71.1	29.8
12-mar-06	MER	06:00-9:00	61.4	35.9	275.7	54.5	110.4	74.1
12-mar-06	PED	06:00-9:00	7.9	11.6	89.9	18.2	36.3	8.3
12-mar-06	TLA	06:00-9:00						
18-mar-06	MER	06:00-9:00	23.5	31.6	137.3	26.9	55.3	49.5
18-mar-06	PED	06:00-9:00	10.0	10.1	150.8	26.5	60.3	10.1
18-mar-06	TLA	06:00-9:00	9.5	11.9	82.2	14.5	31.7	12.6
24-mar-06	MER	06:00-9:00	30.4	32.2	131.7	28.1	61.8	45.9
24-mar-06	PED	06:00-9:00	10.3	12.8	114.5	21.3	46.7	9.7
24-mar-06	TLA	06:00-9:00	12.6	17.2	77.4	14.6	34.7	13.0
30-mar-06	MER	06:00-9:00	25.4	24.1	270.0	51.4	120.5	26.7
30-mar-06	PED	06:00-9:00	6.7	8.2	96.5	17.3	40.8	8.6
30-mar-06	TLA	06:00-9:00	14.5	23.0	191.8	40.6	87.6	42.3
05-abr-06	MER	06:00-9:00	27.1	50.4	171.0	36.9	85.7	72.2
05-abr-06	PED	06:00-9:00	10.1	31.6	116.2	22.9	51.5	12.4
05-abr-06	TLA	06:00-9:00	13.0	17.5	143.9	27.3	60.6	25.8
11-abr-06	MER	06:00-9:00	24.8	61.4	168.8	34.9	74.8	61.7

### 3.4 *Tratamientos estadísticos utilizados*

La primera parte del análisis consistió en la obtención de estadísticos descriptivos (máximos, mínimos,  $P_{90}$ ,  $P_{75}$ ,  $P_{25}$  y  $P_{10}$ , coeficiente de variación, la mediana y promedio) para cada uno de los parámetros de estudio. Esto se realizó en el paquete estadístico STATISTICA<sup>MR</sup>.

La estadística descriptiva permitió observar los intervalos de concentración, las variaciones en las concentraciones tanto en los sitios de muestreo (variación espacial) como en los años que comprendió el estudio (variación temporal).

Para examinar las asociaciones entre variables, principalmente entre Ozono y COV's se obtuvo la matriz de correlación para cada sitio estudiado. Para incrementar la certidumbre de los resultados, el análisis se complementó con Análisis de Factores. En conjunto, estos resultados permitieron identificar los COV's de mayor importancia en la concentración de Ozono y continuar con el siguiente análisis: el cálculo de ecuaciones para estimar la concentración de Ozono esperada en función de la concentración de los COV's más importantes. Este análisis se realizó en el paquete STATISTICA, asumiendo una relación lineal, con coeficientes que multiplicaban la concentración de los COV's involucrados en la ecuación (12) de tipo:

$$[O_3] = x[COV_1] + y[COV_2] + z[COV_3] + \dots n[COV_n] \quad \dots(12)$$

### 3.5 *Cálculo del Potencial de Formación de Ozono (POCP) para fuentes de Compuestos Orgánicos Volátiles*

Una vez terminados los cálculos estadísticos, se continuó con el cálculo del Potencial de Formación de Ozono para las fuentes ( $POCP_F$ , por sus siglas en inglés) de los COV's en la ZMVM. Para ello se tomó como referencia el trabajo

realizado por Derwent et al. (2007), donde se estimó el POCP de diversas fuentes de COV's. Esto es la sumatoria de la emisión de COV's (kton/año) multiplicada por el POCP del compuesto en particular, de acuerdo a la ecuación (13):

$$POCP_F = \sum Emisión\ total\ de\ COV's_i * POCP_i \quad \dots(13)$$

Donde  $POCP_i$  es el potencial de formación de Ozono de cada compuesto químico, y la emisión de COV's estimado (kton/año), se calculó de acuerdo a la ecuación (14):

$$Emisión\ total\ de\ COV's_i = \frac{\% \text{ del COV}}{\text{en el Perfil de emisión de la fuente } i} * Emisión\ total\ IE \quad \dots(14)$$

El perfil de emisión es la composición química, expresada en porcentaje de cada compuesto, de una fuente específica de COV's. Estos datos fueron proporcionados por el IMP. Los datos de la Emisión total de COV's (ton/año) se tomaron del Inventario de Emisiones (IE) 2006. Esta información es esencial para establecer la importancia de cada fuente en la formación de Ozono en la ZMVM. En este trabajo, se incluyeron las fuentes de las cuales se cuenta con información del perfil de emisión y que se contemplan en el IE (Tabla 3.5).

Una vez que se aplicaron las ecuaciones (9) y (10) para obtener el  $POCP_F$  se realizó una categorización de la importancia de las fuentes en la concentración de Ozono.

La última parte del análisis consistió en examinar los casos en los que la concentración de Ozono superó el límite permisible de 95 ppb equivalente a 86 puntos IMECA como promedio horario, el cual nunca debería ser rebasado, como se establece en la NOM-020-SSA1-2014.

**Tabla 3.5** Fuentes de COV's que cuentan con perfil de emisión e incluidas en el IE 2006.

Fuentes en el Perfil de Emisión		Fuentes en el Inventario de Emisiones
Aplicación de asfalto		Aplicación de asfalto
Manejo y distribución de gas LP		Distribución y almacenamiento de gas LP Fugas en instalaciones de gas LP Hidrocarburos no quemados en la combustión de gas LP
Tintorerías a percloroetileno		Lavado en seco
Tintorerías que usan otros disolventes		Lavado en seco
Relleno sanitario		Relleno sanitario
Emisiones de vehículos por evaporación		No incluido
Emisiones de vehículos a gasolina		Autos particulares, taxis, combis, pick up vehículos hasta de 3 toneladas, vehículos de más de 3 toneladas y motocicletas
Emisiones de vehículos a diesel		Microbuses, tractocamiones y autobuses
Talleres mecánicos uso de desengrasantes en el sur y norte de la ciudad		Uso comercial y doméstico de disolventes
Talleres de serigrafía		Artes gráficas
Talleres de aplicación de barnices en el sur y norte de la ciudad		Industria de la madera y productos de madera
Talleres de impresión en el sur y norte de la ciudad		Artes gráficas
Talleres de pintura de autos		Pintura automotriz
Aplicación de pintura acrílica en construcciones		Recubrimiento de superficies arquitectónicas
Aplicación de pintura vinílica en construcciones		Recubrimiento de superficies arquitectónicas
Cocción de alimentos	Restaurantes	No incluido
	Tortillerías	
	Rosticerías	
	Comida rápida	

Una vez identificados estos casos, se analizaron las condiciones de presencia/concentración de precursores de Ozono en conjunto con la meteorología de superficie (condiciones de temperatura, velocidad y dirección de los vientos) que pudieron generar dichos niveles máximos. También se analizaron los casos contrarios, es decir, aquéllos en los que el Ozono permaneció en valores mínimos. Estos análisis permitieron evaluar el comportamiento de las variables ambientales en los casos de mínima y máxima contaminación por Ozono.

## Capítulo 4

### *Resultados y Discusión*

#### **4.1 Estadística descriptiva de Compuestos Orgánicos Volátiles**

La estadística descriptiva de la concentración total de COV´s se obtuvo desde tres perspectivas: por sitio de muestreo, para observar la distribución de los niveles de COV´s en el área de estudio (4 sitios); por año de muestreo para identificar cambios y tendencias de las concentraciones de estos compuestos en el tiempo (4 años); y por horario de muestreo, para analizar las variaciones de las concentraciones a lo largo del día (24 hrs).

#### **Concentraciones de COV´s por sitio de muestreo**

Como se describió anteriormente, se contó con información de 4 sitios de muestreo: XAL (NE de la ZMVM), TLA (al NO de la ZMVM), MER (C de la ZMVM) y PED (SO de la ZMVM). El intervalo de concentración de COV´s fue muy amplio, desde 133 ppbC (registrado en TLA) hasta más de 4000 ppbC (medido en MER). Este último sitio de muestreo junto con XAL fueron los que registraron los niveles más altos de COV´s. En el caso opuesto se observó a PED, en donde generalmente se observaron los valores menores. El C.V. (coeficiente de variación) demuestra que en el sitio de TLA hay una mayor amplitud de concentraciones, a diferencia del sitio XAL donde los niveles se concentran en un valor (Tabla 4.1).

Los altos niveles de COV´s en el centro y norte de la ZMVM ya han sido reportados en estudios anteriores y se deben al mayor número de fuentes tanto

industriales como móviles que ocurren en esas zonas [SMA-GDF, INE-DGCENICA y UAMI, 2008]. En dichos estudios también se ha identificado que la zona sur de la ZMVM es principalmente receptora de COV's (los cuales son transportados por los vientos dominantes que circulan de noreste a suroeste), ya que las fuentes de contaminantes son menores tanto en número como en intensidad comparadas con el norte de la ciudad.

**Tabla 4.1** Estadística descriptiva de las concentraciones de COV's por sitio de muestreo.

Sitio	MAX <sup>1</sup>	MIN <sup>2</sup>	P <sub>90</sub> <sup>3</sup>	P <sub>75</sub> <sup>4</sup>	P <sub>25</sub> <sup>5</sup>	P <sub>10</sub> <sup>6</sup>	Mediana	Promedio	C.V. <sup>7</sup>
XAL	3545.60	584.88	2911.94	2085.40	1102.25	964.00	1558.30	1741.62	45.42
PED	2784.46	149.20	1129.26	705.28	356.93	276.17	488.51	636.44	69.01
MER	4056.13	264.82	2537.08	1941.92	627.77	388.33	989.73	1278.99	57.61
TLA	2389.60	133.42	1647.60	1094.82	605.36	434.26	695.47	899.07	67.12

1. MAX: Máximo
2. MIN: Mínimo
3. P<sub>90</sub>: Percentil 90
4. P<sub>75</sub>: Percentil 75
5. P<sub>25</sub>: Percentil 25
6. P<sub>10</sub>: Percentil 10
7. C.V.: Coeficiente de variación

### **Concentración de COV's en los años 2002-2006**

Se analizaron las concentraciones de los COV's a lo largo de 4 años: 2002, 2003, 2005 y 2006. En la tabla 4.2 se muestran las concentraciones de COV's en estos años, donde se registró un intervalo de 133 hasta más de 4000 ppbC, ambos en 2006, en el que resultaron los niveles más altos y más bajos de COV's. Sin embargo, se aprecia que en 2003 los niveles de estos contaminantes también fueron altos. En el caso contrario, los valores mínimos se registraron no solo en 2006, sino también en el año 2002. El C.V. presentó valores similares para los 4 años.

En cuanto al comportamiento de los COV's a lo largo del tiempo de estudio, no se observó una tendencia clara, ya que los valores de estos contaminantes aumentaron y disminuyeron sin mostrar un valor definido.

**Tabla 4.2** Estadística descriptiva de las concentraciones de COV's (ppbC) durante 2002-2006 en la ZMVM.

Año	MAX <sup>1</sup>	MIN <sup>2</sup>	P <sub>90</sub> <sup>3</sup>	P <sub>75</sub> <sup>4</sup>	P <sub>25</sub> <sup>5</sup>	P <sub>10</sub> <sup>6</sup>	Mediana	Promedio	C.V. <sup>7</sup>
2002	2401.22	209.76	1590.77	1094.38	510.80	383.44	669.25	876.38	63.13
2003	3545.60	255.56	2470.34	1869.94	405.23	292.56	720.50	1136.20	76.74
2005	2784.46	240.54	2143.03	1769.11	441.82	290.02	1109.37	1204.16	62.75
2006	4056.13	133.42	1188.28	871.34	467.58	374.35	645.91	774.58	71.24

1. MAX: Máximo
2. MIN: Mínimo
3. P<sub>90</sub>: Percentil 90
4. P<sub>75</sub>: Percentil 75
5. P<sub>25</sub>: Percentil 25
6. P<sub>10</sub>: Percentil 10
7. C.V.: Coeficiente de variación

### **Concentración horaria de COV's**

En este análisis, se contó con información de concentraciones de COV's para las 24 horas del día. Se agruparon 4 horarios de 6 horas cada uno: 00:00-06:00, 06:01-12:00, 12:01-18:00 y 18:01-24:00. Como se observa en la Figura 4.1, el intervalo de concentraciones de COV's durante el día, resultó de ≈250 hasta 3500 ppbC, destacando el horario de 06:01-12:00, donde se presentaron los niveles más altos de estos contaminantes. El horario de 18:01-24:00 mostró el caso opuesto, donde generalmente se registraron los valores mínimos de COV's.

Estos resultados concuerdan con los reportes del IE (2006), donde se estimó que las horas con mayor emisión se encuentran en un horario de 07:00-15:00, y donde se estima que se libera el 48% de las emisiones diarias.

### **4.2 Estadística descriptiva de Óxidos de nitrógeno y Ozono**

La estadística descriptiva de las concentraciones de los Óxidos de nitrógeno y Ozono contempló las mismas perspectivas de los COV's: por sitio de muestreo, por año de muestreo y por horario de muestreo, como se explica a continuación. Se analizaron los mismos sitios de los COV's (XAL, TLA, MER y PED). En la Figura 4.2 el inciso a) observó un intervalo de concentración de NO<sub>2</sub> de 10 hasta 85 ppb y que las concentraciones fueron ligeramente menores en PED comparado

con los demás sitios; en el inciso b) el intervalo de concentración de los NO<sub>x</sub> es similar al intervalo del NO<sub>2</sub> de ≈10 hasta ≈200 ppb, con algunos valores extremos de ≈500 ppb en XAL; en el inciso c) se mostró el intervalo de concentraciones de Ozono, fue de 1 hasta ≈110 ppb, siendo PED el sitio donde se registraron los niveles más altos de Ozono con valores extremos de ≈240 ppb.

En la Figura 4.3 se graficaron las concentraciones de los contaminantes por año de estudio. En el inciso a) los años 2002, 2003 y 2006 registraron valores altos de NO<sub>2</sub>, especialmente el año 2003 con concentraciones máximas de ≈90 ppb y extremas ≈180 ppb; en el inciso b) se observa que en el año 2006 ocurrieron las concentraciones más bajas de NO<sub>x</sub> aunque las concentraciones extremas alcanzaron ≈530 ppb, las mayores del periodo de estudio; en el inciso c) de la Figura 4.3 las concentraciones de Ozono presentaron fluctuación a lo largo de los años de estudio, y en el año 2003 se dieron los niveles mayores de este contaminante.

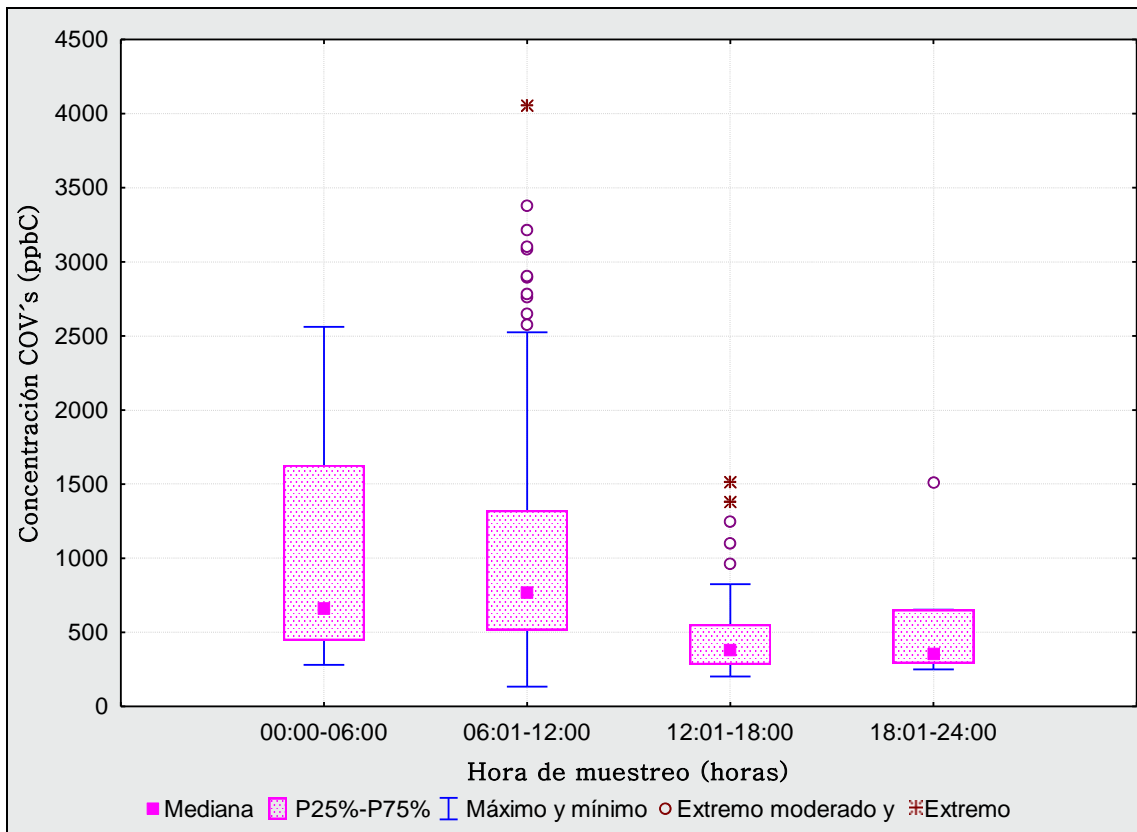
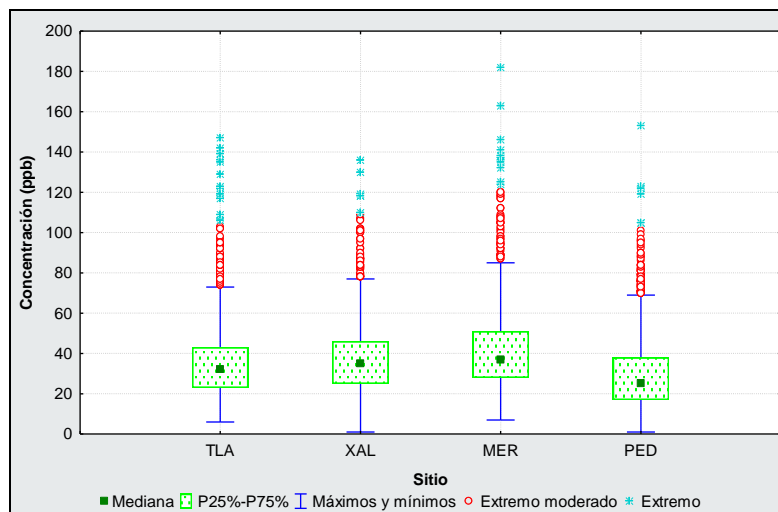


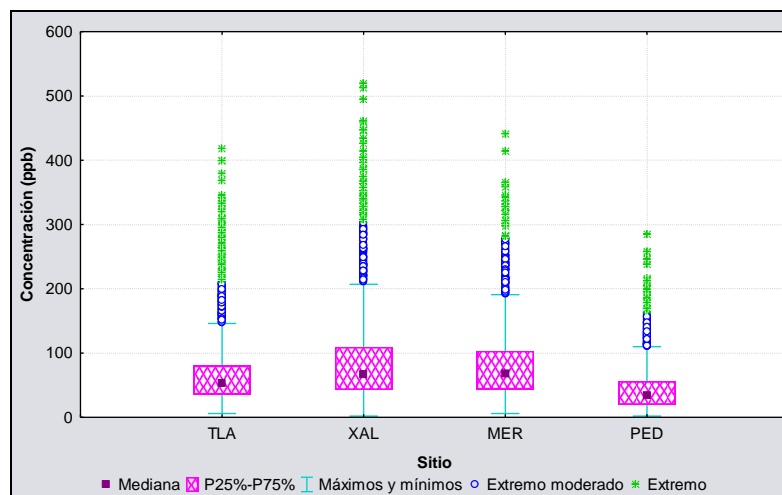
Figura 4.1 Estadística descriptiva de las concentraciones de COV's a lo largo del día.



a) NO<sub>2</sub>



b) NO<sub>x</sub>



c) Ozono

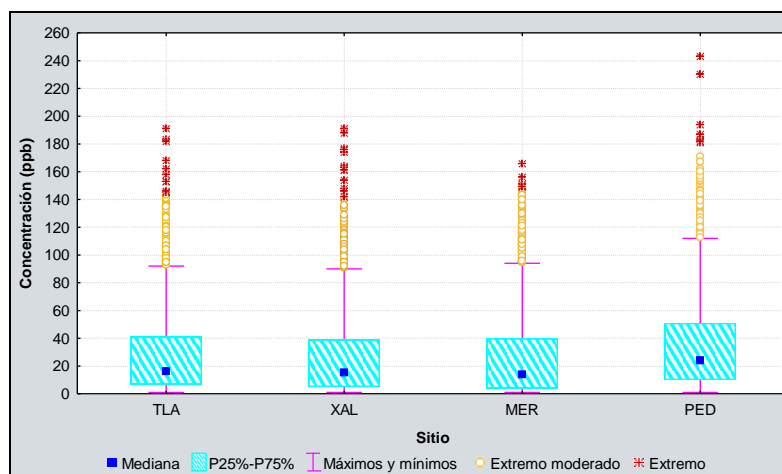
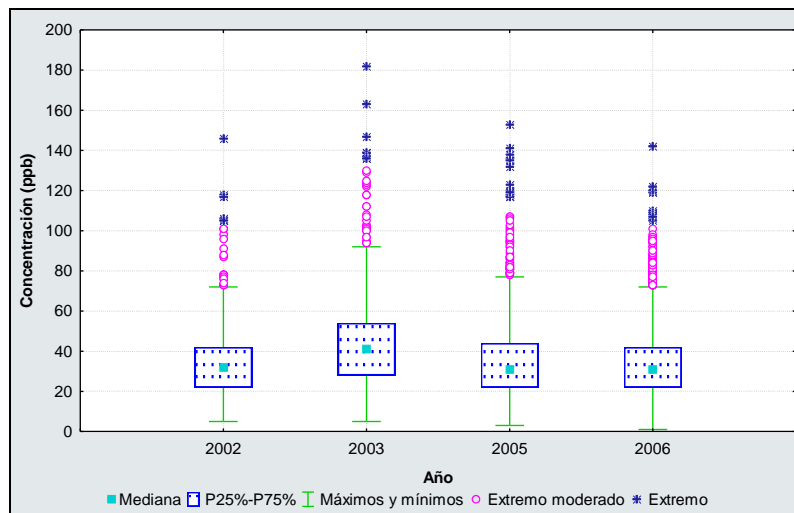
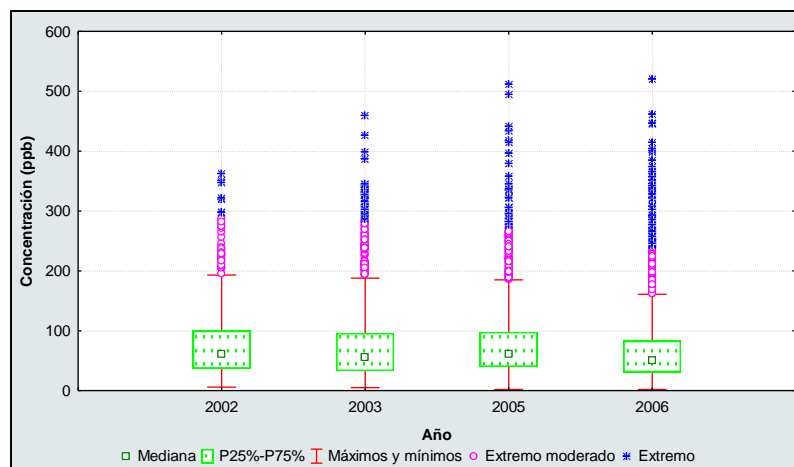


Figura 4.2 Estadística descriptiva de las concentraciones de NO<sub>2</sub> (a), NO<sub>x</sub> (b) y Ozono (c) por sitio.

a) NO<sub>2</sub>



b) NO<sub>x</sub>



c) Ozono

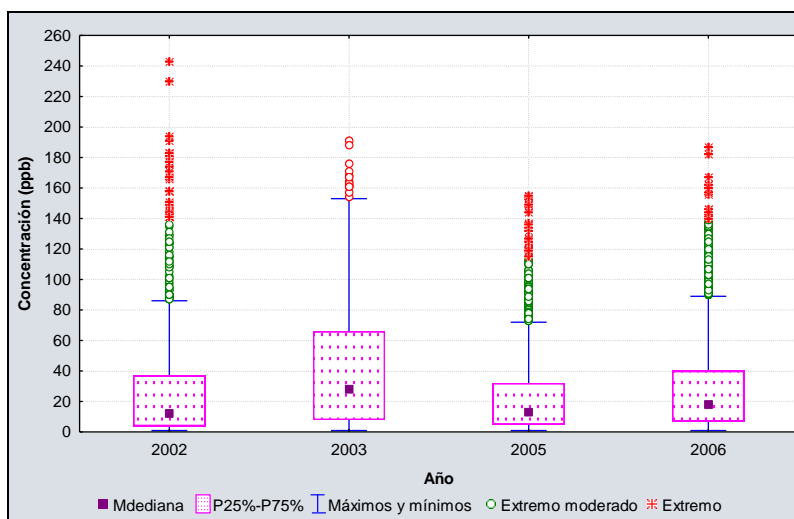


Figura 4.3 Estadística descriptiva de las concentraciones de NO<sub>2</sub> (a), NO<sub>x</sub> (b) y Ozono (c) por año.

La variación horaria del Ozono,  $\text{NO}_2$  y  $\text{NO}_x$  a lo largo del día se muestran en la Figura 4.4. Se eligió para este ejemplo uno de los días de mayor concentración de Ozono en PED (16/04/2003). El gráfico describe el proceso típico de generación de Ozono, que se mantiene en concentraciones bajas durante las primeras horas del día y conforme las emisiones de  $\text{NO}_2$  y  $\text{NO}_x$  se incrementaron, en conjunto con la luz solar, la producción de Ozono también alcanza su máxima concentración a las 16:00 horas (171 ppb). A partir de las 19:00, en ausencia de energía solar, el Ozono disminuye sus valores hasta llegar a concentraciones mínimas.

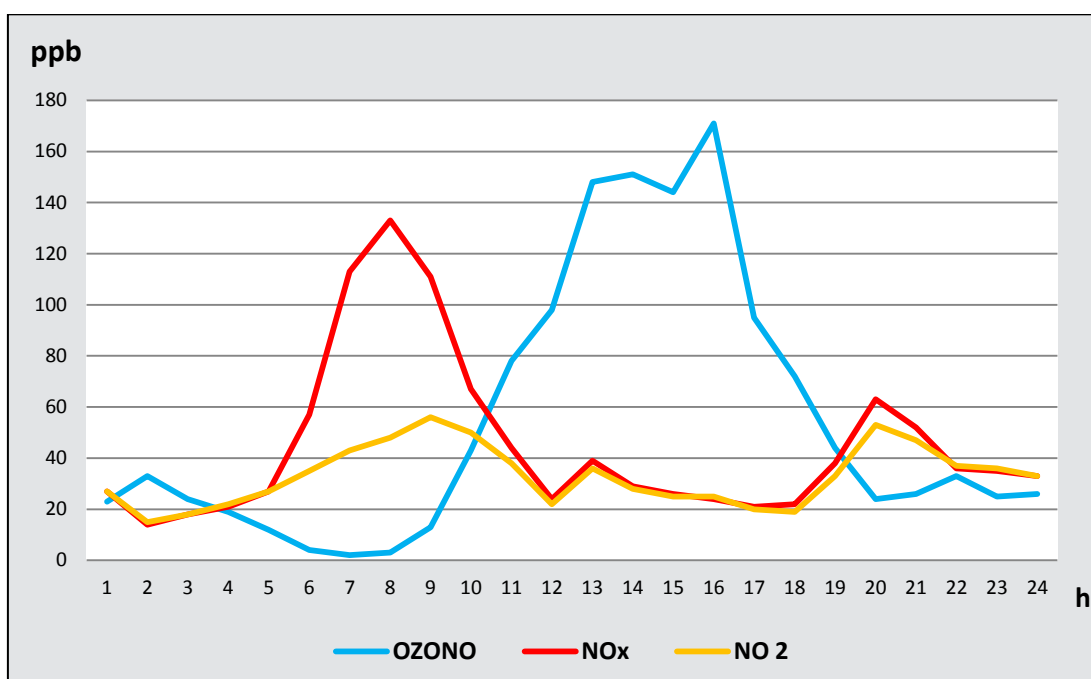


Figura 4.4 Variación horaria de las concentraciones de Ozono,  $\text{NO}_2$  y  $\text{NO}_x$  a lo largo del día.

### 4.3 Asociaciones entre variables

Para el estudio de las asociaciones entre la concentración de Ozono, COV's y  $\text{NO}_x$  se obtuvo la matriz de correlación y se realizó el Análisis de Factores. En conjunto, los análisis permitieron identificar los COV's de mayor relación con la concentración de Ozono.

### 4.3.1 Matriz de correlación

La matriz de correlación se obtuvo para explorar la relación entre las concentraciones de Ozono, COV's totales y los Óxidos de nitrógeno. Este tipo de análisis se realizó en el paquete estadístico STATISTICA<sup>MR</sup>. En la Tabla 4.3 inciso a) se aprecia la matriz de correlación del sitio TLA, en este sitio no se encontraron asociaciones definidas; en el inciso b) los resultados para XAL presentaron relaciones positivas moderadas del Ozono con los COV's, mientras que para MER y PED tampoco se encontraron coeficientes de correlación significativos.

Estos resultados señalan principalmente 2 aspectos: la complejidad de la relación entre los contaminantes, y las diferencias entre sitios, derivada del uso de suelo en cada uno de ellos. De esta manera, era de esperarse que los sitios emisores (esto es, con mayor número de fuentes de COV's) como XAL, se observara una asociación más clara entre el Ozono y los COV's, a diferencia de los sitios que, además de las fuentes locales, reciben contaminantes debido al transporte de los mismos por acción del viento. En este último caso se encuentra PED.

**Tabla 4.3** Matriz de correlación (Pearson) de los contaminantes en a) Tlalnepantla, b) Xalostoc, c) Merced, d) Pedregal.

a) Tlalnepantla					b) Xalostoc				
Variables	COV's totales	NO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	O <sub>3</sub>	Variables	COV's totales	NO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	O <sub>3</sub>
COV's TOTALES	1.00	0.13	0.09	-0.12	COV's TOTALES	1.00	0.34	0.03	0.69
NO <sub>2</sub>		1.00	0.76	0.38	NO <sub>2</sub>		1.00	0.37	0.52
NO <sub>x</sub>			1.00	0.20	NO <sub>x</sub>			1.00	0.00
O <sub>3</sub>				1.00	O <sub>3</sub>				1.00

c) Merced					d) Pedregal				
Variables	COV's totales	NO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	O <sub>3</sub>	Variables	COV's totales	NO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	O <sub>3</sub>
COV's TOTALES	1.00	0.19	0.15	0.19	COV's TOTALES	1.00	0.08	0.06	-0.08
NO <sub>2</sub>		1.00	0.81	0.59	NO <sub>2</sub>		1.00	0.64	0.38
NO <sub>x</sub>			1.00	0.50	NO <sub>x</sub>			1.00	0.05
O <sub>3</sub>				1.00	O <sub>3</sub>				1.00

### 4.3.2 *Análisis de Factores*

El análisis de factores (A. F.) pertenece al grupo de análisis exploratorio, tiene por objetivo establecer estructuras en la base de datos y permite identificar las variables más importantes, así como la manera en que se asocian. Para este análisis se utilizaron, a diferencia del cálculo para la matriz de correlación, las concentraciones de COV's individuales, es decir, de 70 compuestos orgánicos, de Ozono, de NO<sub>2</sub> y de NO<sub>x</sub>. Este análisis se realizó en el programa STATISTICA.

Del A.F. se obtuvieron 3 Factores (F<sub>1</sub>, F<sub>2</sub>, F<sub>3</sub>, mismos que el STATISTICA arroja) en cada sitio de estudio recordando que la importancia de los Factores decrece de F<sub>1</sub> a F<sub>3</sub>. Esto significa que la variabilidad de los datos que cada Factor puede explicar es mayor en F<sub>1</sub> con respecto a F<sub>2</sub> o a F<sub>3</sub>. Los números en rojo representan aquellos valores que tienen una carga >0.7; lo cual se traduce en una mayor importancia en el Factor. Por el contrario, aquellos compuestos con cargas bajas pueden ser eliminados ya que no tienen influencia importante en el estudio; el signo de cada carga indica cómo se relaciona (directa o indirectamente) con los demás componentes dentro del Factor. De acuerdo a la Tabla 4.4, se puede concluir que cada sitio de estudio tiene COV's distintos que se relacionan con la concentración de Ozono, como se discute a continuación.

Para cada sitio se seleccionó el Factor en donde el Ozono hubiera alcanzado un mayor peso, para identificar los COV's que también fueron importantes en ese Factor y que por lo tanto tienen una mayor relación con el Ozono. En el caso de TLA el Ozono obtuvo un valor de -0.18 en el segundo Factor. Los COV's más importantes de ese Factor fueron los aromáticos (oXILE y mETOLUE). En XAL el Ozono se ubicó en el primer Factor con un valor de 0.74 y relacionado con aromáticos (BENCE y mETOLUE), con alcanos (nBUTA y PENTA) y algunos alquenos ramificados (T2PENTE y C2PENTE). En MER y PED el Ozono mostró cargas bajas y negativas en el segundo Factor, siendo de nuevo los compuestos aromáticos los de mayor carga.

Tabla 4.4 Resultado del Análisis de Factores para los sitios de Tlalnepantla, Xalostoc, Merced y Pedregal.

Variable	TLA			XAL			MER			PED		
	F1	F2	F3	F1	F2	F3	F1	F2	F3	F1	F2	F3
ETAN	0.09	-0.32	0.29	0.7	0.07	0.57	0.45	-0.05	-0.05	0.17	0.13	0.66
ETILE	-0.03	-0.25	0.17	0.74	0.09	0.58	0.56	0.06	-0.12	0.19	0.1	0.58
PROPA	0.64	-0.29	0.43	0.88	0.24	0.07	0.82	-0.12	0.13	0.38	0.01	0.64
iBUTA	-0.03	-0.38	0.69	0.16	0.76	-0.2	0.15	0.28	0.03	0.48	0.43	0.16
PROPIl	0.24	-0.38	0.71	0.89	0.08	0.29	0.08	0.27	-0.06	0.55	0.32	0.02
nBUTA	0.83	-0.02	-0.17	0.93	0.21	0.02	0.82	-0.15	0.08	0.32	-0.22	0.64
ACETIL	0.69	-0.25	0.47	0.66	0.03	0.41	0.69	0.07	0.18	0.37	0.14	0.49
T2BUTE	0.94	0.06	-0.13	0.87	0.04	-0.15	0.62	-0.11	0.02	0.88	-0.09	0.11
1BUTE	0.84	0.09	-0.1				0.04	-0.05	-0.05	0.92	-0.09	0.02
C2BUTE	0.79	-0.15	0.28	0.88	0.27	-0.03	-0.07	0.24	-0.03	0.88	0.13	-0.06
1PENTE	0.62	0.1	0	-0.24	-0.02	0.69	-0.1	0.16	0.1	0.71	0.22	-0.09
iPENTA	0.36	-0.2	0.13	0.86	0.26	0.03	0.75	-0.22	0.1	-0.03	-0.25	0.38
PENTA	0.7	0.32	-0.33	0.86	0.25	0.15	0.79	-0.13	0.06	0.52	-0.2	0.53
ISOPRE	0.26	0.21	-0.07	0.76	-0.09	-0.25	0.29	0.12	0.02	0.7	0.13	-0.01
T2PENTE	0.97	0.01	-0.16	0.86	0.2	0.22	0.74	-0.15	0.44	0.95	-0.13	0.01
C2PENTE	0.95	-0.09	0.15	0.8	0.17	0.1	0.15	-0.02	0.57	0.97	0.02	0.01
22MBUTA	0.98	0.01	-0.02	0.85	0.07	-0.01	0.65	-0.19	0.42	0.88	-0.08	0.22
CPENTA	0.85	-0.04	0.31	-0.32	0.04	-0.24	0.23	0.01	0.78	0.96	0.12	0.03
23MBUTA	0.93	-0.07	0.2	-0.31	0.75	0.42	0.27	0.11	0.41	0.94	0.08	0.08
1HEXE	0.82	-0.08	0.24				-0.1	0	0.84	0.91	-0.04	-0.01
2MPENTA				0.79	0.25	0.38	0.93	0.06	0.1	0.02	0.04	0.84
3MPENTA				0.62	0.21	0.51	0.94	0.07	0.11	0.02	0.04	0.84
HEXA	0.91	-0.07	0.26	0.86	0.12	0.02	0.44	-0.17	0.79	0.96	0.05	0.08
MCPENTA	0.73	0.33	-0.29	0.72	0.53	0.28	0.61	0.07	0.48	0.7	-0.01	0.16
24MPENTA	0.9	0.02	0.16				-0.11	-0.08	0.9	0.84	0.1	0.01
CHEXA	0.94	-0.01	0.07	-0.17	0.72	0.53	0.01	-0.07	0.9	0.86	0.05	0.15
2MHEXA	0.96	0.04	0.16	0.58	0.73	0.14	0.47	-0.12	0.68	0.8	0.02	0.3
23MPENTA	0.93	0.02	0.11	0.77	0.09	0.6	0.19	-0.06	0.84	0.82	0.1	0.1
3MHEXA	0.88	0.08	0.26	0.82	-0.13	0.35	0.4	-0.1	0.64	0.75	0.16	0.31
HEPTA	0.76	-0.01	0.55	0.81	0.18	0.39	0.36	-0.09	0.77	0.79	0.3	0.25
BENCE	0.15	-0.09	0.91	0.8	-0.13	0.13	0.27	-0.03	0.91	0.3	0.55	0.34
224MPENTA	0.09	0.14	0.85				-0.12	0.02	0.88	0.22	0.59	0.03
MCHExA	0.18	0.19	0.84	0.33	0.69	0.35	0.11	0.12	0.82	0.27	0.65	0.05
234MPENTA	0.19	0.23	0.85	0.55	0.46	0.41	0.21	0.06	0.89	0.25	0.64	0.19
2MHEPTA	0.16	0.28	0.84	0.15	0.9	-0.27	-0.09	0.01	0.69	0.25	0.61	0.02
OCTA	0.12	0.21	0.73	0.48	0.48	0.42	0	0.15	0.89	0.25	0.66	0.09
TOLUE	0.06	-0.05	0.94	-0.19	0.21	-0.3	0.44	0.1	0.54	0.24	0.67	0.14
NONA	-0.01	0.63	-0.06	0.01	0.07	-0.15	-0.05	0.39	-0.06	0.01	0.43	-0.1
EBENCE	0.02	0.28	0.86	0.7	0.61	0.25	0.18	0.58	0.18	0.14	0.89	0.13
mXILE	-0.07	0.79	0.5				-0.01	0.43	0.16	0.05	0.86	0.01
pXILE	-0.1	0.58	0.59				0.02	0.7	-0.01	0.03	0.84	0.03
mpXILE				0.71	0.59	0.28	0.91	0.07	0.1	0.01	0.07	0.86
ESTIRE	-0.02	0.68	0.48	-0.16	0.4	0.58	-0.06	0.71	0	0.11	0.81	-0.06
oXILE	0.01	0.86	0.22	0.65	0.65	0.26	0.2	0.8	-0.05	0.04	0.83	0.24
iPBENCE	0.02	0.67	0.09				0.02	0.84	0.01	-0.01	0.73	0
nPBENCE	-0.04	0.83	0.06	0.75	0.57	0.07	-0.01	0.72	0.01	0.04	0.82	0.02
mETOLUE	0.02	0.89	0.22	0.97	0.04	-0.15	0.04	0.95	0.03	0.02	0.83	0.01
135MBENCE	-0.01	0.8	0.1	0.47	0.64	0.32	-0.02	0.76	-0.04	-0.04	0.74	-0.04
oETOLUE	-0.03	0.91	-0.07	0.24	0.35	0.76	-0.01	0.92	-0.03	-0.01	0.66	-0.01
124MBENCE	0	0.89	0.02	0.47	0.77	0.35	0.41	0.75	0.1	0	0.68	0.3
DECA	0.06	0.57	-0.08	-0.18	0.02	-0.29	-0.02	0.93	0.01	0.09	0.74	-0.04

Continuación...

Variable	Sitio	TLA			XAL			MER			PED		
		F1	F2	F3	F1	F2	F3	F1	F2	F3	F1	F2	F3
123MBENCE		-0.02	0.81	0.01				0.01	0.83	0.06	-0.05	0.59	0
mDEBENCE		-0.03	0.74	-0.01				0.01	0.71	0.01	-0.06	0.32	-0.03
pDEBENCE		0.03	0.29	-0.02				0.01	0.78	0	-0.1	0.3	-0.03
nUNDECA		-0.02	0.75	-0.01				0.02	0.73	-0.05	-0.06	0.43	-0.04
DODECA		-0.03	0.35	0				0.01	0.5	-0.01	-0.03	0.17	0.01
13BUTADIE					0.09	0.67	-0.31	0.83	0.06	0.11	0	0.04	0.68
2M1BUTE					0.53	-0.12	-0.25	0.43	0.03	0.08	0.02	0.02	0.56
2M2BUTE					0.93	-0.18	-0.03	0.88	0.06	0.1	-0.01	0.01	-0.06
PROPINO					0.06	-0.17	0.14				0	0	0.04
IOCTA					0.82	0.25	0.36	0.93	0.07	0.12	0.01	0.07	0.82
25MHEXA								0.85	0.06	0.09	-0.01	0.02	0.64
24MHEXA					0.71	0.08	0.6	0.89	0.07	0.12	0.03	0.02	0.48
124MCHEXA					0.14	0.86	-0.35				0	0.03	0.15
pETOLUE					0.76	0.1	0.55	0.84	0.06	0.11	-0.01	0.03	0.83
pPBENCE					0.13	0.89	-0.31				0	0.04	0.24
MTBE					0.89	0.03	0.09	0.88	0.06	0.1	0.03	0.02	0.74
EACETA								0.5	0.04	0.09	0.01	0	-0.01
iBUTE					0.04	-0.01	0.14	0.87	0.07	0.09	-0.01	0.04	0.62
NO2		0	-0.33	0.35	0.43	-0.05	-0.28	0.22	-0.19	0.06	0.08	0.02	0.21
NOX		-0.08	-0.39	0.47	0.24	-0.41	-0.05	0.23	-0.28	0.15	0.08	-0.02	0.26
OZONO		-0.13	-0.18	-0.15	0.74	0.07	-0.4	0.15	-0.20	0.06	-0.14	-0.18	0.13
Expl.Var		16.68	10.88	10.05	25.4	10.08	6.85	17.4	10.9	11.96	16.18	12.3	9.96
Prp.Totl		0.29	0.19	0.18	0.42	0.17	0.11	0.24	0.15	0.17	0.22	0.17	0.13

En conjunto, el análisis de factores indicó que los compuestos aromáticos están en relación más estrecha con los valores de Ozono y que algunos compuestos como el NONA o el DODECA no alcanzaron valores altos en ningún Factor, por lo que pudieran ser descartados de análisis posteriores sin perder información. Estos resultados corroboran que cada sitio presenta características propias, si bien hay una tendencia a que los compuestos aromáticos estén más relacionados con el Ozono (Tabla 4.5).

**Tabla 4.5** COV's de mayor relación con el Ozono de acuerdo a los resultados del Análisis de Factores.

Sitio	COV's
TLA	oXILE, mETOLUE, nPBENCE, oETOLUE, 124MBENCE, nUNDECA, mXILE, 135MBENCE, 123MBENCE, mDEBENCE
XAL	ETAN, ETILE, PROPAN, PROPIL, nBUTA, T2BUTE, C2BUTE, mETOLUE, iPENTA, PENTA, ISOPRE, T2PENTE, C2PENTE, 22MBUTA, 2MPENTA, HEXA, MCPENTA, 23MPENTA, 3MHEXA, HEPTA, BENCE, mpXILE, nPBENCE, 2M2BUTE, IOCTA, 24MHEXA, pETOLUE, MTBE
MER	iPBENCE, mETOLUE, oETOLUE, 123MBENCE, DECA, nUNDECA, pXILE, ESTIRE, oXILE, nPBENCE, 135MBENCE, 124MBENCE, mDEBENCE, pDEBENCE
PED	EBENCE, mXILE, pXILE, ESTIRE, oXILE, iPENCE, nPBENCE, mETOLUE, 135MBENCE, DECA

### 4.3.3 Ecuación empírica de ajuste

Hasta el momento se han utilizado herramientas estadísticas sencillas para analizar el comportamiento, variabilidad y asociaciones de las concentraciones ambientales de COV's, NO<sub>x</sub>, NO<sub>2</sub> y Ozono.

Tomando como base los resultados del Análisis de Factores (Tabla 4.4) se desarrolló una ecuación que permitiera predecir la cantidad de Ozono que se obtendría a partir de una concentración determinada de ciertos COV's en cada sitio de estudio. El desarrollo de la ecuación involucró una serie de pasos que se describen en el Anexo-Desarrollo de la ecuación empírica de ajuste. Primero se compilaron los datos de las concentraciones de Ozono (variable dependiente) y de los COV's (variables independientes) previamente identificados como importantes por su asociación con la concentración de Ozono. Se planteó una ecuación lineal (ec. 9) y se realizó un proceso de ensayo y error modificando los COV's involucrados y la operación matemática a los cálculos, hasta llegar a la ecuación con mejores parámetros de ajuste ( $R^2$ , residuales).

De esta manera, para el sitio de XAL, la ecuación con mejor ajuste incluyó al nBUTA, mETOLUE y 2M2BUTE, logrando explicar el 54% de las concentraciones de Ozono (Figura4.5). En la Figura 4.6 se muestra la ecuación empírica de ajuste para el sitio de la MER que produjo menores predicciones de la concentración de Ozono (explicó el 39% de las concentraciones) incluyó al mTOLUE, oETOLUE y DECA. Para los sitios de PED (Figura4.7) y TLA (Figura4.8) no se pudo obtener una ecuación satisfactoria, ya que solo se pudo explicar un 3 % y 20% respectivamente (Tabla 4.6).

Hasta ahora, los métodos estadísticos han permitido describir en forma general algunos de los aspectos más importantes en la generación de Ozono, con base en las concentraciones de COV's. Sin embargo, ninguna de las ecuaciones pudo explicar la concentración de Ozono de manera satisfactoria, ya que solo para



Xalostoc se obtuvo un 54%. Otro aspecto que refleja la baja exactitud de las estimaciones es que puede haber más de una solución para un mismo valor observado de Ozono, como se señala en la Figura 4.5 y Figura 4.7.

Para profundizar en este estudio, es necesario emplear métodos que involucren aspectos de reactividad y meteorología, una manera de llevarlo a cabo es utilizar los valores del POCP.

**Tabla 4.6** Ecuación empírica de ajuste para estimar las concentraciones de Ozono en función de ciertos COV's.

Sitio	Ecuación empírica de ajuste	Porcentaje de variación explicado
TLA	$O_3 = 0.0099 * [mETOLUE] + \frac{9.87}{[oETOLUE]} + 1.06^{[124MBENCE]}$	20%
XAL	$O_3 = \frac{4934.3}{[NBUTA]} - \frac{143.4}{[mETOLUE]} - \frac{7.83}{[2M2BUTE]}$	54%
MER	$O_3 = 0.0135 * [mETOLUE] + \frac{67.59}{[oETOLUE]} + \frac{4.48}{[DECA]}$	39%
PED	$O_3 = 1.025^{[EBENCE]} + 1.041^{[mXILE]} + \frac{18.4}{[pXILE]}$	3%

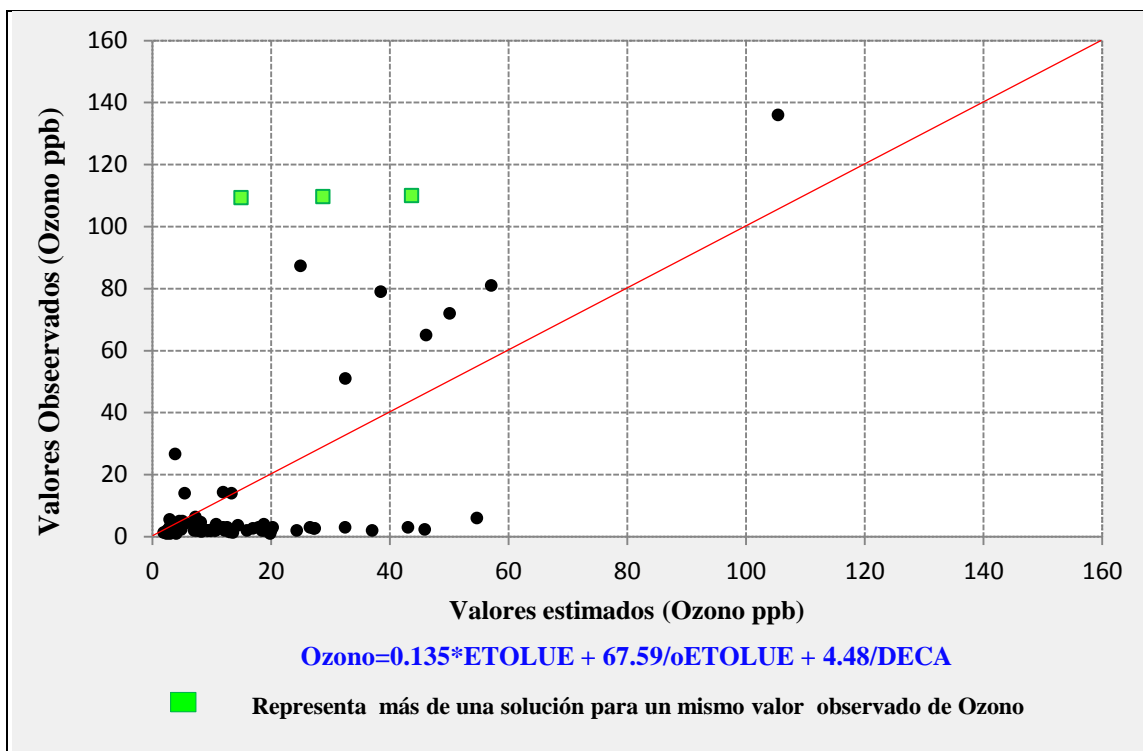


Figura 4.5 Gráfica de paridad entre valores de concentraciones de Ozono observados y estimados en función de COV's en Merced.

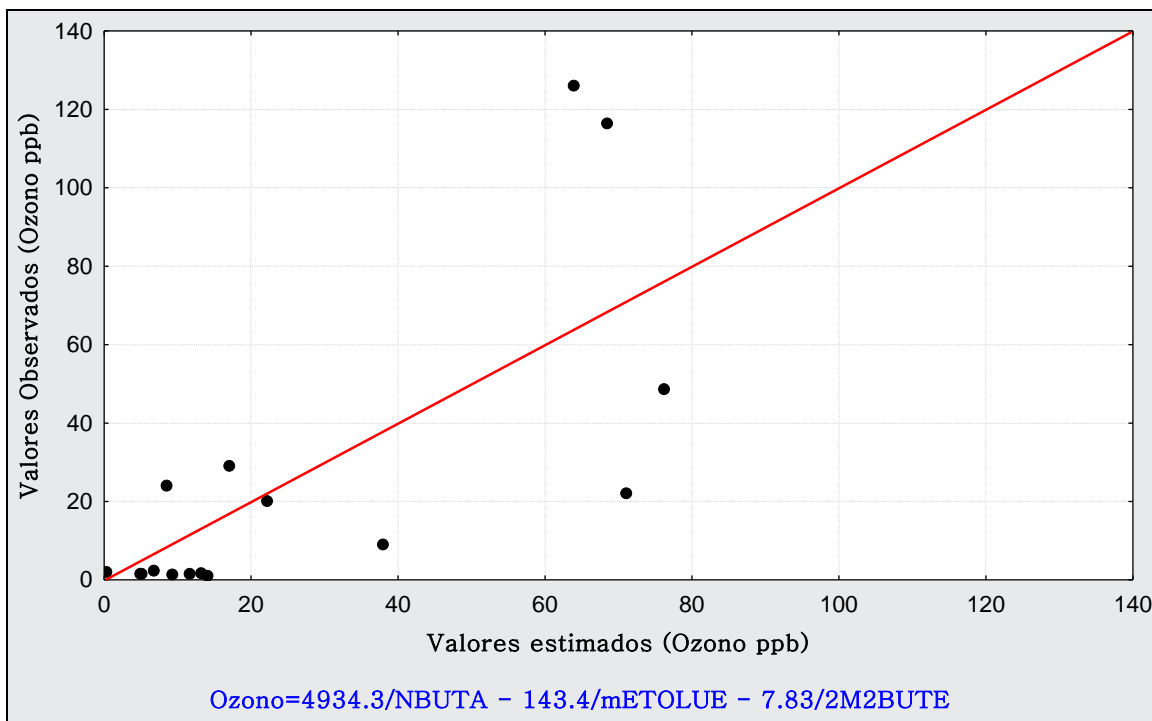
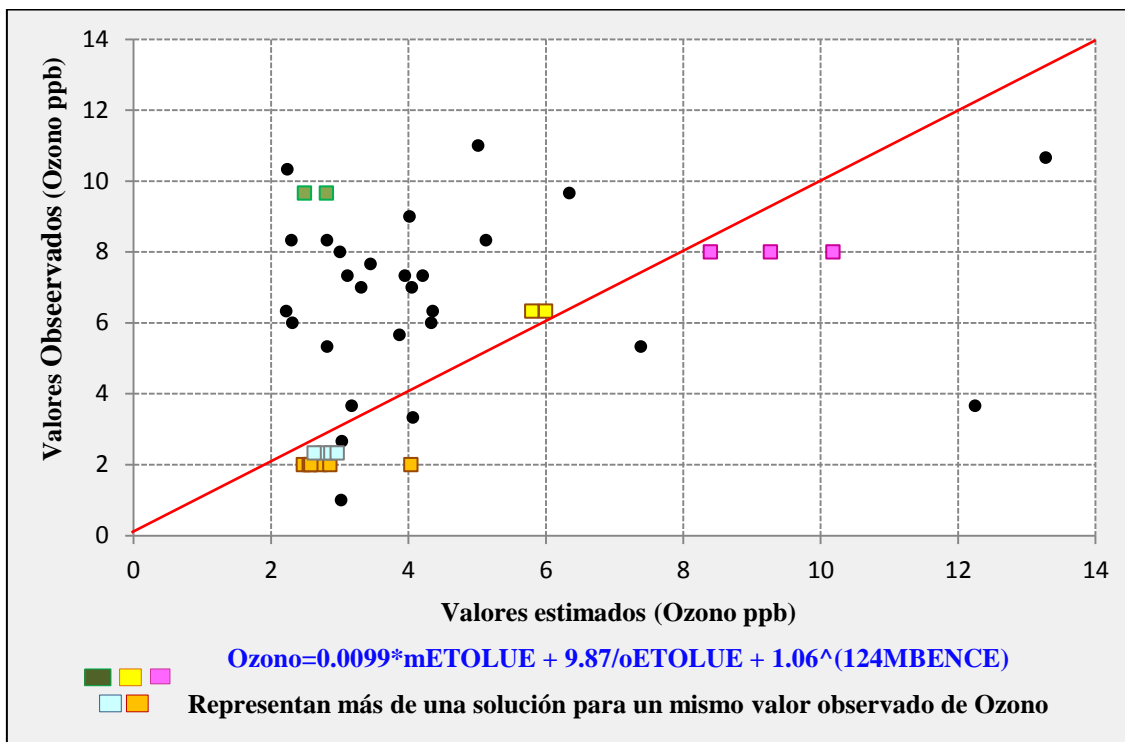
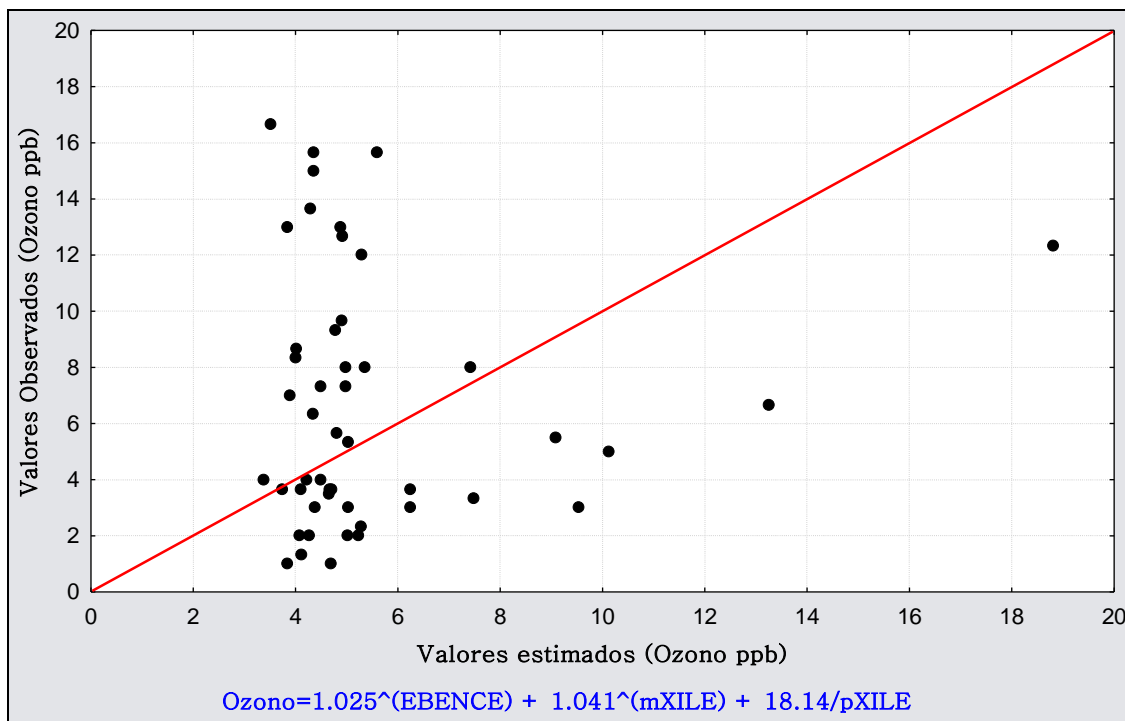


Figura 4.6 Gráfica de paridad entre valores de concentraciones de Ozono observados y estimados en función de COV's en Xalostoc.



**Figura 4.7** Gráfica de paridad entre valores de concentraciones de Ozono observados y estimados en función de COV's en Tlalnepantla.



**Figura 4.8** Gráfica de paridad entre valores de concentraciones de Ozono observados y estimados en función de COV's en Pedregal.

#### **4.4 Potencial de formación de Ozono (POCP) de diversas fuentes de COV's**

Siendo el Ozono un contaminante secundario, su concentración depende de la cantidad y tipo de fuente de los precursores, así como de factores meteorológicos que pueden favorecer o disminuir su concentración. Aunque cada compuesto orgánico reacciona de diferente manera, se pueden hacer generalizaciones basadas en la estructura molecular de los compuestos, es decir, si son alcanos, alquenos, alquinos, etc. Y así anticipar el tipo de mecanismos de reacción en la atmósfera y por ende, su participación en la formación de Ozono.

Como se ha mencionado en secciones anteriores, la base de los cálculos fueron los trabajos de Derwent 1996 y 2007, donde se publicaron los valores de POCP para cada uno de los COV's. La aportación del presente trabajo consiste en conjuntar tanto la información de perfiles de emisión, como del IE (2006) de la ZMVM, para obtener el POCP por fuente, llamada  $POCP_F$ , y contribuir al conocimiento de la generación de Ozono en la ZMVM.

El primer paso en el cálculo del  $POCP_F$  fue reunir los perfiles de emisión para fuentes establecidas en la ZMVM y verificar cuales están incluidas en el IE 2006. El perfil de emisión representa la composición química de las emisiones y el IE la magnitud de esa emisión (es decir, de la fuente), los datos se emplearon de acuerdo a la ecuación (13) para obtener la emisión del COV, a su vez esta información se empleó en la ecuación (14) para llegar al valor de  $POCP_F$ . En el Anexo-Base de datos para el cálculo del  $POCP_F$  de COV's, se muestran las bases de datos utilizadas para el cálculo del  $POCP_F$  de las fuentes enlistadas en la Tabla 3.5.

Se observó que las fuentes con  $POCP_F$  alto fueron las que emiten COV's de mayor reactividad, lo cual era un resultado esperado (Tabla 4.7).

En la Tabla 4.7 se presentan las fuentes de mayor importancia en la formación de Ozono y los COV's más abundantes en esas fuentes. Como se observa, los compuestos aromáticos dominan las emisiones de vehículos a gasolina (fuente móvil), de los talleres de desengrasadoras (fuentes puntuales) y de los vehículos a diesel (fuente móvil).

Esta composición química determinó el valor del  $POCP_F$ . Los valores han sido ordenados de manera decreciente y se incluyó la emisión evaporativa de los vehículos a gasolina, de la cual se cuenta con el perfil de emisión pero desafortunadamente no se contabiliza en el IE, por lo que no es posible determinar su  $POCP_F$ . En cuanto a la cocción de alimentos, tampoco es posible determinar su  $POCP_F$ , ya que no se contabiliza en el IE.

Los resultados de la Tabla 4.7 incorporan una gran cantidad de información sobre los compuestos orgánicos volátiles: la reactividad fotoquímica ( $POCP$ ), la mezcla de COV's emitidos en cada fuente (perfil de emisión) y la magnitud de las emisiones de un proceso o actividad específica (IE).

De esta manera, la fuente que posee mayor impacto en la generación de Ozono troposférico en la ZMVM son los autos a gasolina, esto se explica por el número de vehículos circulando diariamente y por la emisión de compuestos aromáticos provenientes del escape de dichos vehículos.

Los talleres de desengrasado ocuparon el segundo lugar en la lista de  $POCP_F$ , aunque su valor es una quinta parte del  $POCP_F$  de los autos a gasolina. En estos talleres se ocupan disolventes para la limpieza de motores y otras partes de los vehículos (ligeros y pesados). Generalmente estas operaciones se realizan sin ningún control de emisiones o de recuperación de vapores, lo cual se refleja en el valor de  $POCP_F$  y los convierte en una fuente potencial de formación de Ozono que debería ser controlada.

Tabla 4.7 Fuentes de COV's ordenadas de mayor a menor conforme a los resultados del POCP<sub>F</sub>.

Fuente	COV's más abundantes	%	POCP <sub>F</sub> (kton/año)
Emisiones de vehículos a gasolina	ACETIL	0.11	150
	ISOPRE	0.10	
	TOLUE	0.09	
	mpXILE	0.07	
	224MPENTA	0.05	
Talleres mecánicos uso de desengrasantes en el sur y norte de la ciudad	TOLUE	0.13	30
	PENTA	0.08	
	mpXILE	0.07	
	PROPA	0.06	
	ETILE	0.05	
Emisiones de vehículos a diesel	mpXILE	0.15	21
	ISOPRE	0.12	
	PROPA	0.09	
	nBUTA	0.06	
	oXILE	0.05	
Aplicación de pintura vinílica en construcciones	TOLUE	0.47	16
	iBUTE	0.10	
	HEXA	0.08	
	mpXILE	0.07	
	PENTA	0.03	
Manejo y distribución de GLP	PROPA	0.68	16
	nBUTA	0.16	
	iBUTA	0.12	
	ETAN	0.01	
	iBUTE	0.01	
Aplicación de pintura acrílica en construcciones	TOLUE	0.36	13
	BENCE	0.12	
	2MPENTA	0.07	
	mpXILE	0.06	
	PENTA	0.04	
Relleno sanitario	mpXILE	0.36	7
	ESTIRE	0.13	
	EBENCE	0.09	
	PROPA	0.07	
	TOLUE	0.06	
Talleres de serigrafía	TOLUE	0.22	4
	mpXILE	0.10	
	PENTA	0.09	
	HEXA	0.08	
	3MPENTA	0.07	
Tintorerías a percloroetileno	TOLUE	0.66	4
	BENCE	0.08	
	mpXILE	0.04	
	HEXA	0.03	
	2MPENTA	0.02	
Talleres de impresión en el sur y norte de la ciudad	TOLUE	0.28	4
	MTBE	0.07	
	224MPENTA	0.06	
	iBUTE	0.05	
	mpXILE	0.04	
Tintorerías que usan otros disolventes	HEXA	0.39	3
	2MPENTA	0.32	
	MTBE	0.06	
	NONA	0.05	
	22MBUTA	0.03	

Continuación...

Fuente		COV's más abundantes	%	POCP <sub>F</sub> (kton/año)	
Talleres de aplicación de barnices en el sur y norte de la ciudad		TOLUE	0.68	3	
		mpXILE	0.10		
		HEXA	0.04		
		oXILE	0.03		
		PENTA	0.02		
Talleres de pintura de autos		TOLUE	0.55	2	
		mpXILE	0.09		
		HEXA	0.06		
		iBUTE	0.05		
		3MPENTA	0.04		
Aplicación de asfalto		mpXILE	0.18	0.1	
		PROPA	0.13		
		TOLUE	0.08		
		nBUTA	0.07		
		oXILE	0.05		
Emisiones de vehículos por evaporación		PENTA	0.24	ND	
		MTBE	0.11		
		2MPENTA	0.08		
		HEXA	0.05		
		TOLUE	0.04		
Cocción de alimentos	Restaurantes	PROPA	0.26	ND	
		nBUTA	0.17		
		ETILE	0.1		
		ACETIL	0.06		
		ETAN	0.05		
		Tortillerías	PROPA		0.54
			nBUTA		0.25
	ETILE		0.02		
	ACETIL		0.01		
	Rosticerías	iBUTA	0.09		
		PROPA	0.27		
		ACETIL	0.25		
		nBUTA	0.12		
		ETILE	0.06		
	Comida rápida	iBUTA	0.04		
		PROPA	0.32		
		nBUTA	0.18		
ETILE		0.1			
iBUTA		0.06			
		ACETIL	0.06		

ND: NO DETERMINADO

Las emisiones de vehículos a Diesel ocuparon el tercer lugar. Esto significa que las fuentes móviles son las de mayor impacto en la generación de Ozono en la ZMVM.

Los procesos o actividades que ocupan disolventes o compuestos orgánicos también mostraron una participación, aunque menor, en la formación de Ozono. Estas son la: Aplicación vinílica en construcciones, Manejo y distribución de GLP y

la Aplicación de pintura acrílica en construcciones, como las fuentes subsecuentes a las tres primeras.

Las fuentes con menor  $POCP_F$  ( $<10$ ) resultante fueron el relleno sanitario, Talleres de serigrafía, Tintorerías a percloroetileno, Talleres de impresión en el sur y norte de la ciudad, Tintorerías que usan otros disolventes, Talleres de aplicación de barnices en el sur y norte de la ciudad, Talleres de pintura de autos y la Aplicación de asfalto.

Las emisiones evaporativas de vehículos no están registradas en el IE, sin embargo, es factible que tengan un  $POCP_F$  comparable al de emisiones de vehículos a gasolina, en ella abundan principalmente el TOLUE, MTBE, HEXA, PENTA Y 2MPENTA de acuerdo a su perfil de emisión.

#### ***4.5 Análisis de los casos de concentraciones máximas y mínimas de Ozono***

En esta sección se analizan casos particulares de concentraciones extremas de Ozono, tanto altas como bajas. Los casos fueron examinados desde el aspecto meteorológico y de concentración de óxidos de nitrógeno y de COV's registrados hasta dos días antes del caso de estudio. Las concentraciones de Ozono y sus precursores durante todo el caso de estudio (es decir, el día del máximo de Ozono y los dos días que se le precedieron) se graficaron de manera horaria. Cabe recordar que todos los contaminantes exceptuando los COV's fueron medidos por el SIMAT, por lo que se cuenta con información horaria, mientras que los COV's fueron medidos por el IMP en periodos de tres horas, por lo que únicamente se señala en el gráfico la concentración de COV's y el horario de muestreo.



### 4.5.1 Casos de concentraciones máximas de Ozono

El criterio que se tomó para elegir los casos de concentración máxima de Ozono fue que rebasara los 151 puntos IMECA (166 ppb), que conciernen calidades muy mala y extremadamente mala del aire, que claramente superan la NOM-020-SSA1-2014 (Tabla 4.8).

**Tabla 4.8** Casos de concentración máxima de Ozono.

Caso	Fecha	Sitio	IMECA	Concentración (ppb)	Calidad del aire
1	15/02/2002	PED	221	243	<b>EXTREMADAMENTE MALA</b>
2	18/02/2002	TLA	174	191	<b>MALA</b>
3	23/04/2003	XAL	174	191	<b>MALA</b>
4	24/04/2003	XAL	171	188	<b>MALA</b>
5	05/05/2006	PED	170	187	<b>MALA</b>

#### CASO 1

Este caso registró 221 puntos IMECA (243 ppb) en la estación del PED al sur de la ZMVM, el día 15 de febrero de 2002. El análisis incluyó datos meteorológicos y de contaminantes medidos desde 2 días antes del día máximo de Ozono (mismo procedimiento para todos los casos), como se aprecia en la Figura 4.9. Se observa que el Ozono comenzó a incrementar su concentración desde el día anterior al máximo, alcanzando  $\approx 150$  ppb. Las concentraciones de  $\text{NO}_x$  también mostraron niveles altos de aproximadamente 150 ppb, mientras que las concentraciones de  $\text{NO}_2$  alcanzaron cerca de 100 ppb. Estas concentraciones son mayores al valor de la mediana obtenida en la sección 4.2 ( $\approx 40$  para  $\text{NO}_x$  y  $\approx 25$  para  $\text{NO}_2$ ), lo que indica una mayor emisión de estos contaminantes durante los 3 días que comprenden el caso de estudio. El día del máximo Ozono los COV's alcanzaron una concentración máxima de 552.8 ppbC, los 2 días anteriores no se registraron datos de COV's. Entre las especies más abundantes se encontró al T2BUTE, ESTIRE, iOCTA, pETOLUE y el iBUTE.

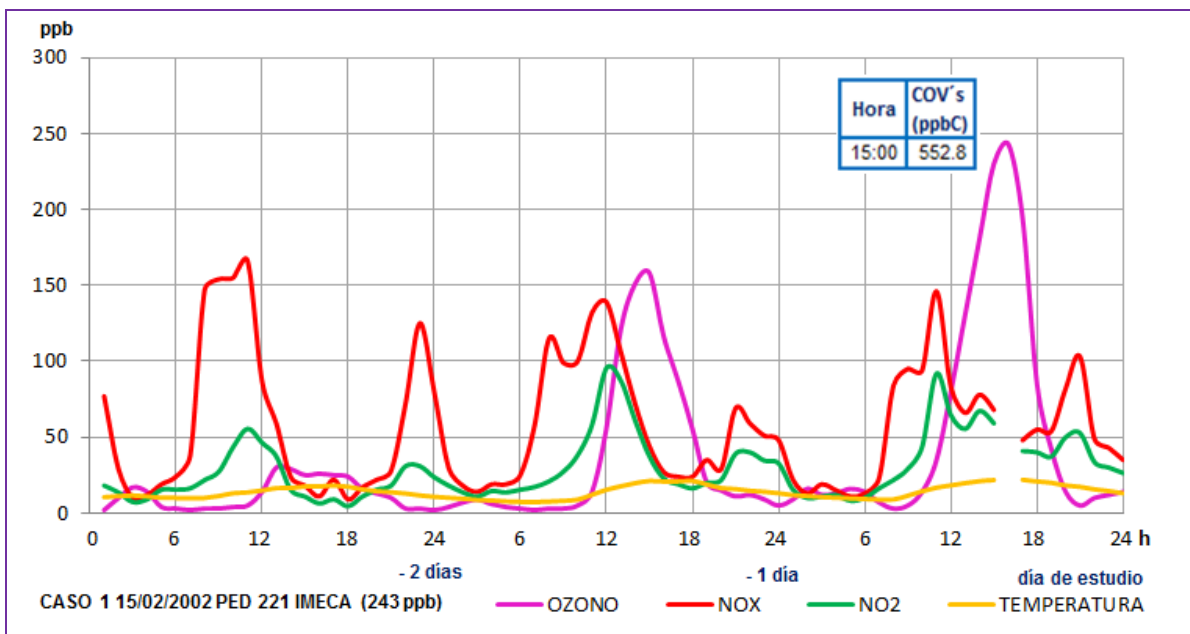
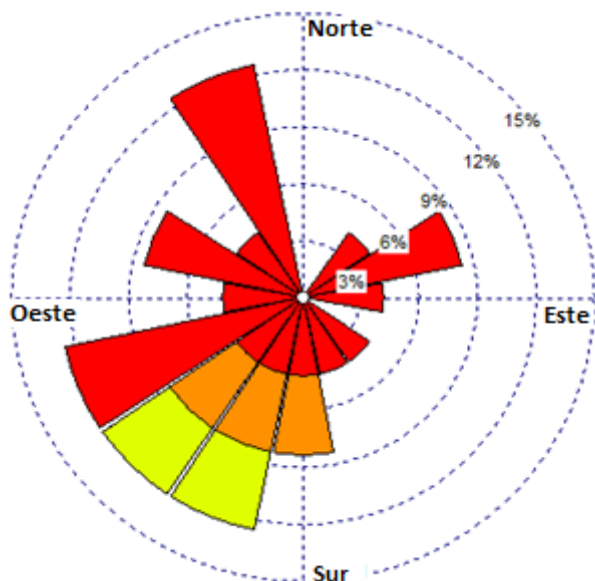


Figura 4.9 Pedregal 221 puntos IMECA (243 ppb).

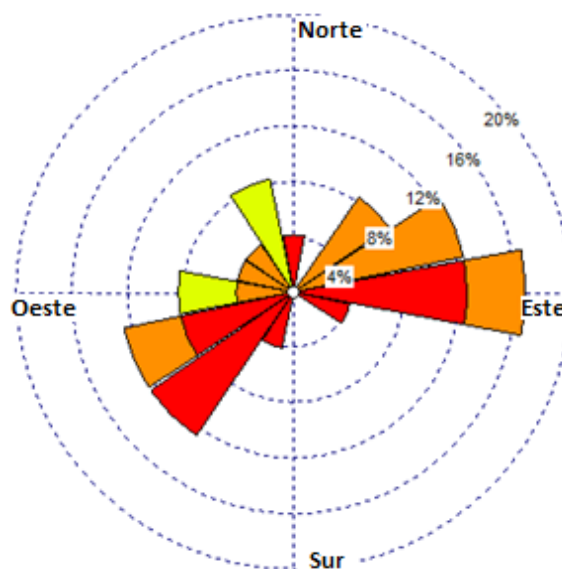
La meteorología de superficie es una variable que determina el estancamiento o dispersión de las masas de aire, esto se traduce en un mejoramiento o empeoramiento de la calidad del aire.

En este sentido, en la Figura 4.10 se aprecian la rosas de los vientos para el CASO 1, desde el día 13 de febrero donde se observó que los vientos provinieron del noroeste con una velocidad de 0.1 a 1.0 m/s y frecuencia del  $\approx 20\%$ , del suroeste con velocidades de hasta 4 m/s y una frecuencia del 36% (Figura 4.10a). Para el día 14 de febrero se registraron velocidades de viento de 0.1 a 1.0 m/s con direcciones opuestas provenientes del este y oeste (Figura 4.10b). El día 15 de febrero los vientos mantuvieron direcciones variables del este, oeste y norte, este comportamiento indica turbulencia que provoca un estancamiento de contaminantes, y por tanto favorece la generación y acumulación (Figura 4.10c). Aunado a ello, la temperatura influyó en este proceso, incrementándose de 18 a 22°C, a lo largo de los 3 días (Figura 4.7).

a)



b)



c)

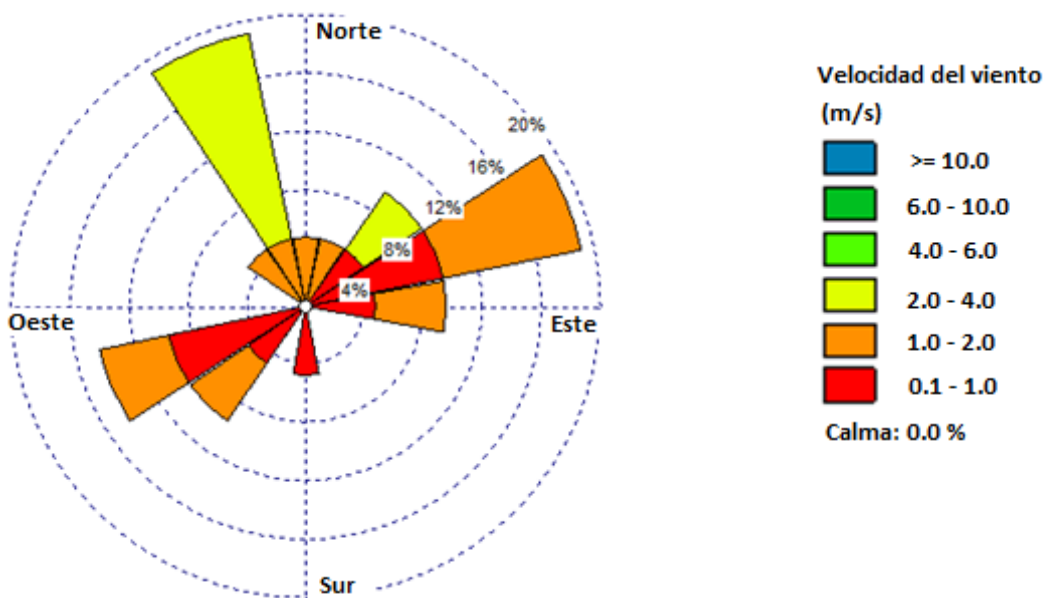


Figura 4.10 Rosas de los vientos observadas el: a) 13/02/2002, b) 14/02/2002 c) 15/02/2002.

## CASO 2

Este caso tuvo lugar en el sitio de TLA, el día 18 de febrero de 2002, registró 174 puntos IMECA (191 ppb). En la Figura 4.11 se aprecia el comportamiento de la concentración de Ozono, en los dos primeros días permaneció constante ( $\approx 90$  ppb), sin embargo, es claro el aumento que se registró en el día de estudio, de 191 ppb a las 17:00 horas. A lo largo de los 3 días, aumento levemente la concentración de  $\text{NO}_2$  ( $\approx 30$  a 50 ppb) y en los dos primeros días la concentración de los  $\text{NO}_x$  fue de  $\approx 60$  ppb, sin embargo, en el día del evento alcanzó una concentración de  $\approx 230$  ppb.

Para este caso no se registraron datos de muestreo de concentraciones de COV's totales a lo largo de los 3 días. En cuanto a la temperatura tampoco se registraron datos.

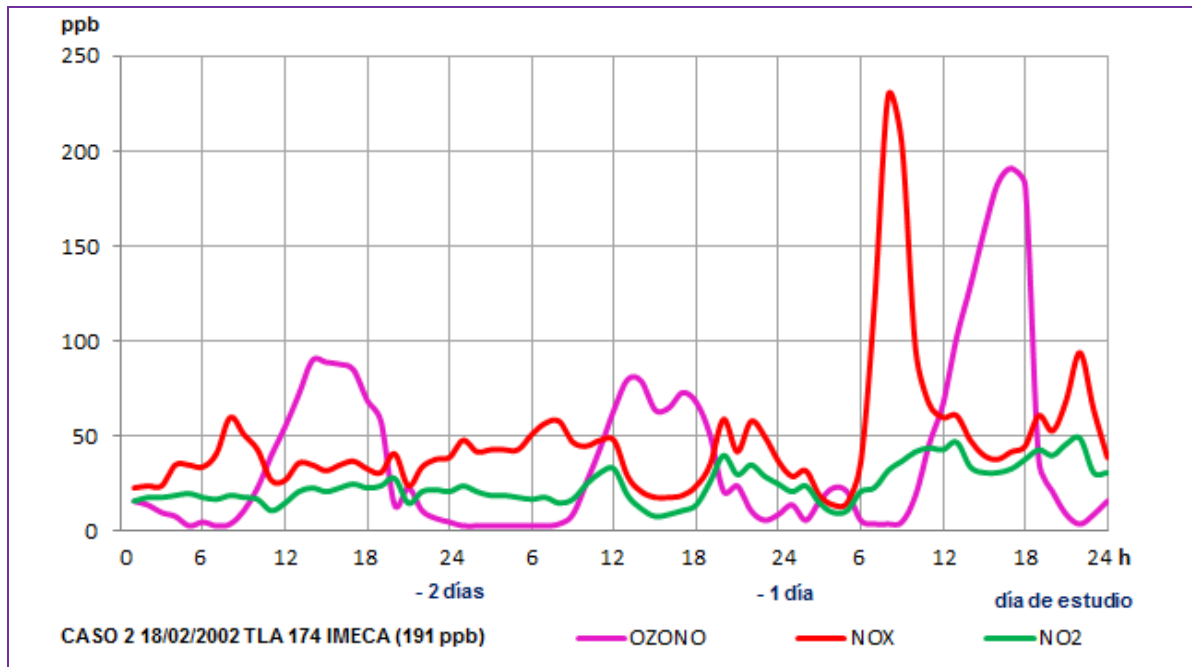


Figura 4.11 Tlalnepantla 174 puntos IMECA (191 ppb).

El día 16 de febrero los vientos provinieron del noroeste con una velocidad de 2.0 a 4.0 m/s y una frecuencia de casi 70% (Figura 4.12a); el día 17 de febrero predominaron vientos con una velocidad de 2.0 a 4.0 m/s que vinieron del noroeste viajando hacia el sureste, es decir, hubo transporte de contaminantes en esta dirección (Figura 4.12b); el día 18 de febrero la rosa indicó direcciones encontradas de los vientos que provinieron del noroeste, oeste, suroeste y sureste con velocidades máximas de 1.0 a 2.0 m/s, lo cual propició la concentración máxima de Ozono en ese día (Figura 4.12c).

### CASO 3

El 23 de abril del 2003 en el sitio de XAL se registró una elevada concentración de Ozono alcanzando los 174 puntos IMECA. El comportamiento del Ozono a lo largo de los 3 días presentó un aumento acentuándose más en el día de su máxima concentración de 191 ppb que ocurrió a las 15:00 horas. Los precursores  $\text{NO}_2$  presentaron un leve aumento en su concentración, mientras que el día del máximo de Ozono la concentración de los  $\text{NO}_x$  fue muy elevada, alcanzando 426 ppb (Figura 4.13).

Por su parte, el comportamiento de los COV's totales presentaron un aumento de su concentración de 1323 ppbC (2 días antes del máximo de Ozono) a 2764 ppbC (día del máximo Ozono), un día antes del evento no se registró concentración de COV's totales. A su vez, entre las especies de mayor concentración se encontraron al ETAN, PROPA, nBUTA, iPENTA y el TOLUE (Figura 4.13).

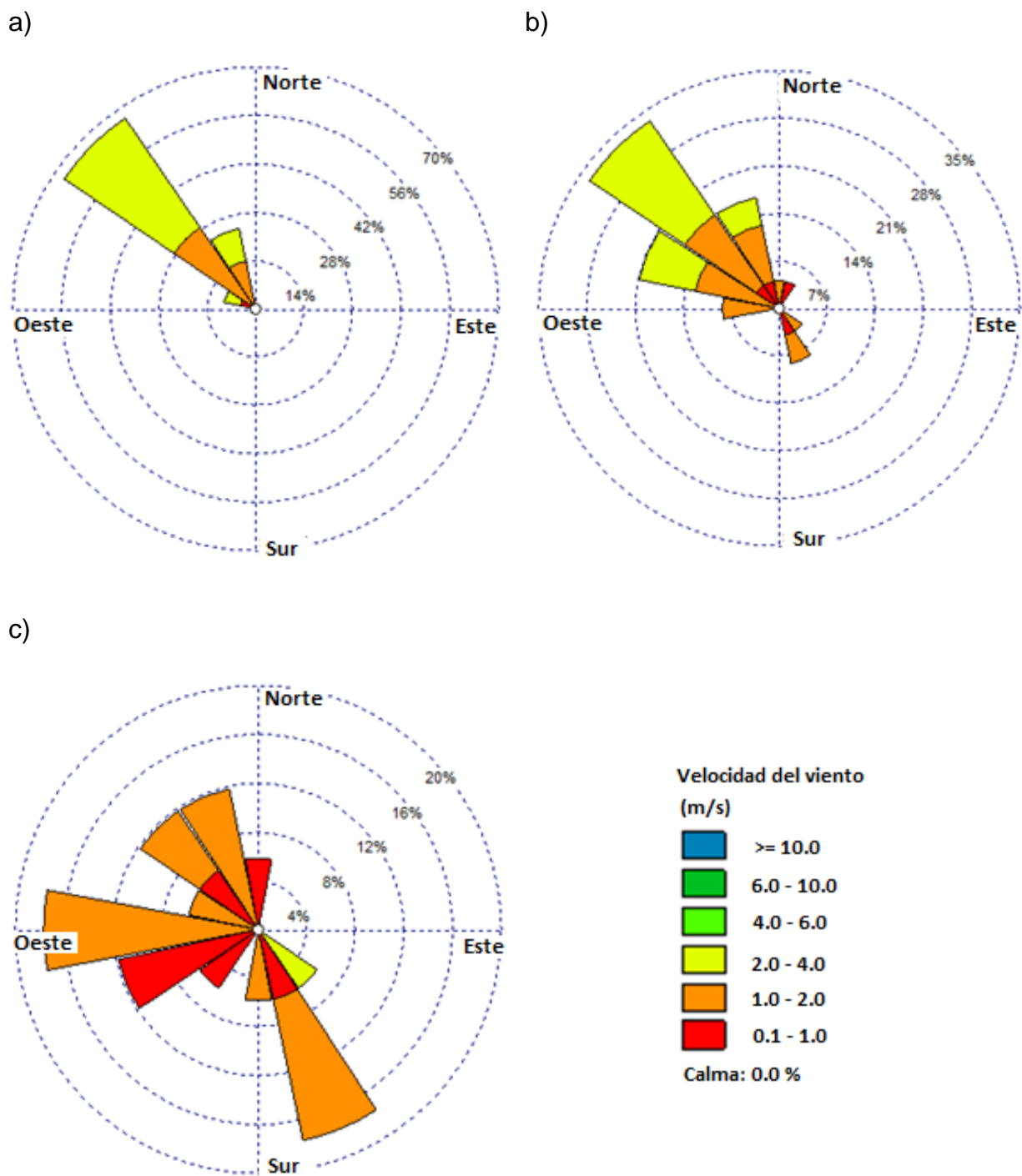


Figura 4.12 Rosas de los vientos observadas el: a) 16/02/2002, b) 17/02/2002 c) 18/02/2002.

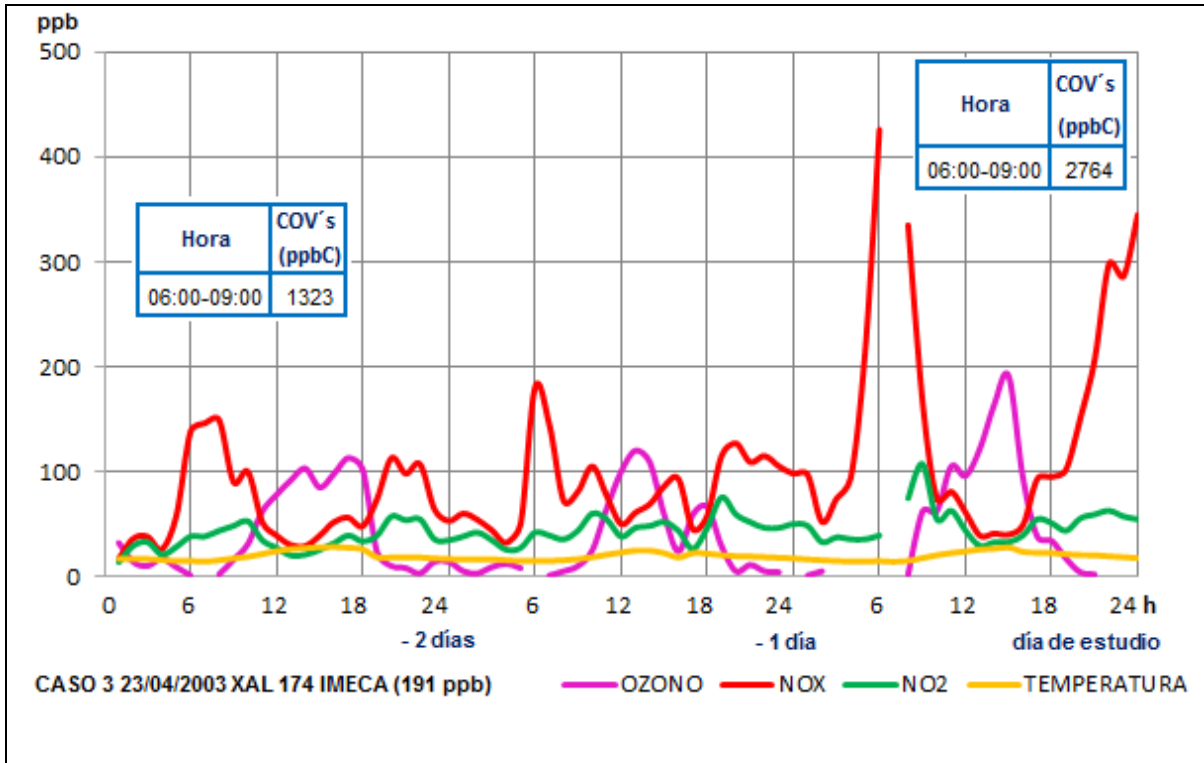


Figura 4.13 Xalostoc 174 puntos IMECA (191 ppb).

Para el día 21 de abril se presentaron vientos en diferentes direcciones provenientes del noreste con una frecuencia de casi 30% y una velocidad de 2.0 a 4.0 m/s, del noroeste, suroeste y sureste con una velocidad de 1.0 a 2.0 m/s; (Figura 4.14a); el día 22 de abril la rosa registró direcciones de viento encontradas que provinieron del noroeste con una velocidad de 0.1 a 1.0 m/s, del sur y suroeste con velocidades de 1.0 a 2.0 m/s y, del noreste con velocidades de 2.0 a 4.0 m/s (Figura 4.14b); el día 23 de abril las direcciones de viento provinieron del norte, este, oeste y sur con velocidades entre 1.0 a 2.0 m/s y 2.0 a 4.0 m/s, que propició el estancamiento de contaminantes y por lo tanto el máximo de Ozono (Figura 4.14c).

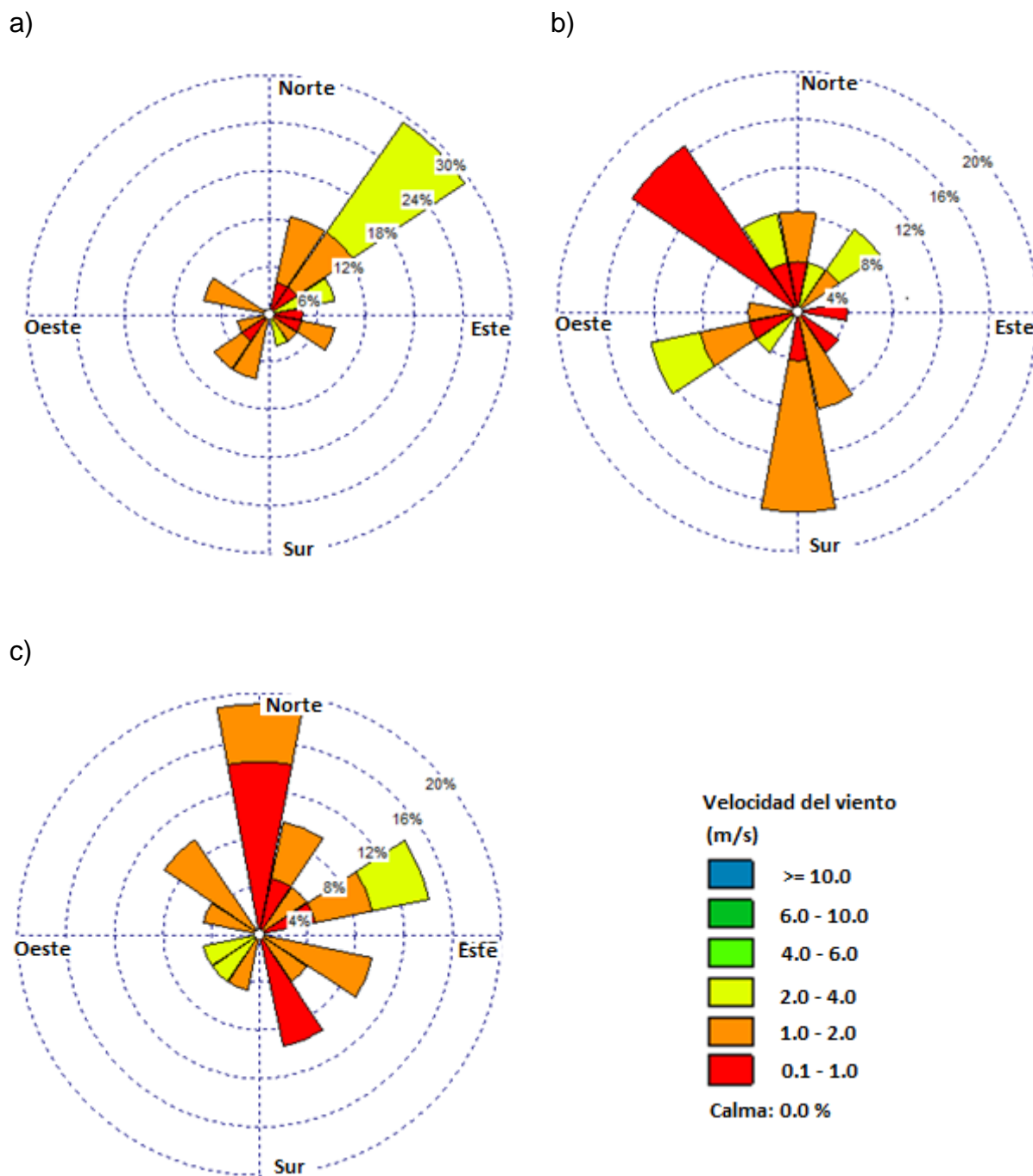


Figura 4.14 Rosas de los vientos observadas el: a) 21/04/2003, b) 22/04/2003 c) 23/04/2003.



## CASO 4

Este caso registró 171 puntos IMECA en la estación de XAL, el día 24 de abril del 2003. Como puede observarse en la Figura 4.15, la concentración del Ozono tuvo un incremento en los dos primeros días y en el día del evento alcanzó 188 ppb a las 15:00 horas. El comportamiento de los precursores a lo largo de los 3 días mostró un leve aumento en la concentración del NO<sub>2</sub> (≈80 a 100 ppb) y los NO<sub>x</sub> presentaron concentraciones muy altas de 426 ppb. Se registraron concentraciones de COV's totales un día antes del evento y en el día del máximo de Ozono que incrementó de 2764 a 3378 ppbC. Las especies más abundantes fueron el PROPA, nBUTA, iPENTA, TOLUE y mpXILE. La meteorología indicó un aumento de la temperatura a lo largo de los 3 días de 24 a 29°C esta última se registró en el día de estudio.

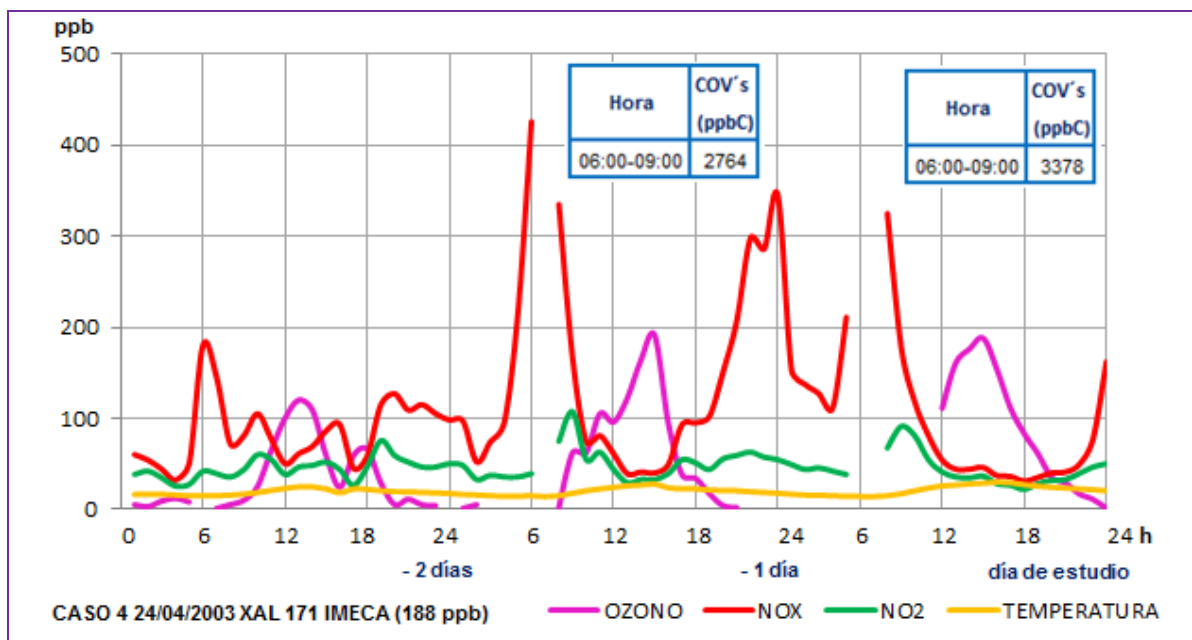


Figura 4.15 Xalostoc 171 puntos IMECA (188 ppb).

Las rosas de viento para este caso se ilustran en la Figura 4.16, donde se observaron para los días 16, 17 y 18 (día del máximo de Ozono) direcciones de vientos encontradas con velocidades de 0.1 a 1.0 m/s en los días 16 y 17, y

velocidades máximas de hasta 4 m/s pero prevaleciendo velocidades de 0.1 a 1.0 m/s el día 18. Este panorama dio lugar al máximo de Ozono, concentrándose los contaminantes en la atmósfera.

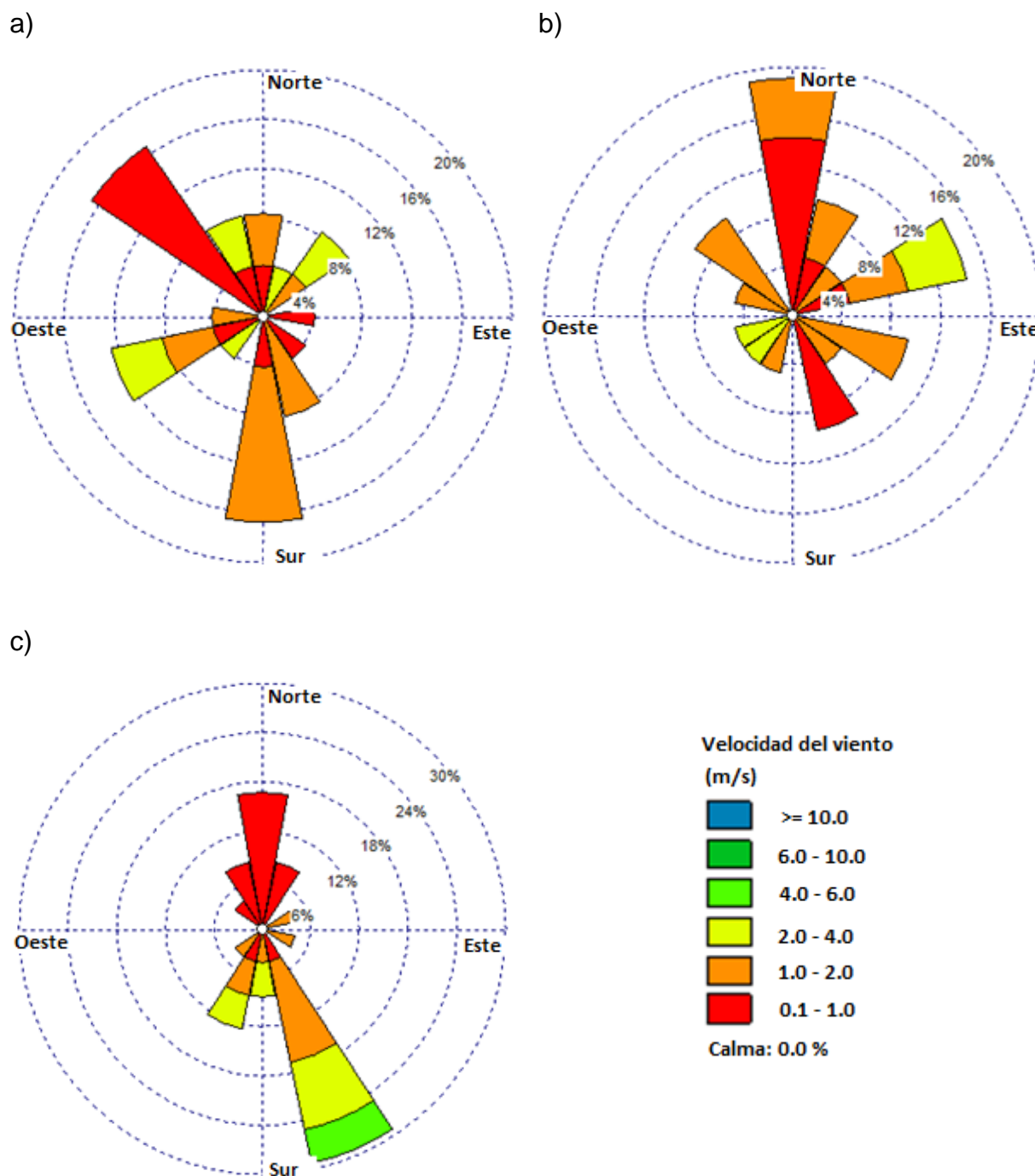


Figura 4.16 Rosas de los vientos observadas el: a) 22/04/2003, b) 23/04/2003 c) 24/04/2003.

## CASO 5

Este caso registró 170 puntos IMECA el día 5 de mayo de 2006 en el sitio del PED. Se aprecia a lo largo de los 3 días que la concentración del Ozono incrementó levemente, sin embargo, su concentración registró 187 ppb el día de su máximo a las 16:00 horas. Los precursores de Ozono, el NO<sub>2</sub> y los NO<sub>x</sub>, presentaron una concentración máxima de 86 ppb y 178 ppb respectivamente a lo largo de los 3 días. Los COV's totales registraron una concentración máxima de 390 ppbC el día del máximo de Ozono a muy tempranas horas (06:00 a 09:00 hrs.), en los 2 primeros días no se registró horario de muestreo. En cuanto a las especies más abundantes se encontraron al PROPA, iBUTA, PROPIL, 1PENTE y el TOLUE. Para este caso no se registró temperatura (Figura 4.17).

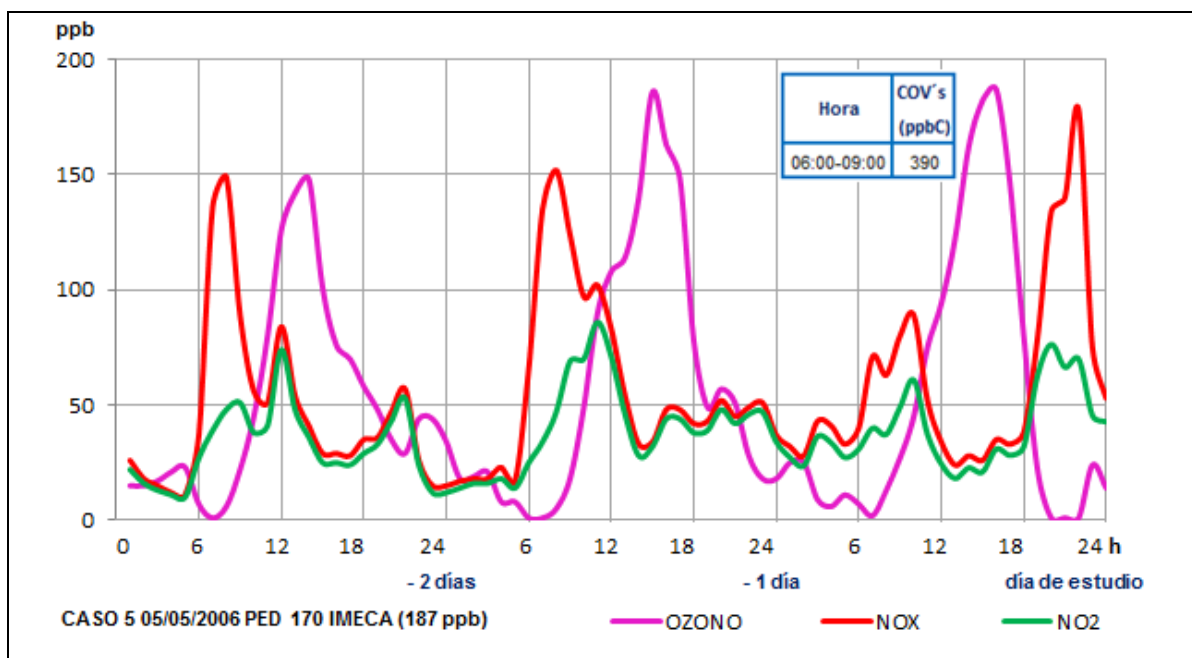


Figura 4.17 Pedregal 170 puntos IMECA (187 ppb).

El día 03 de mayo los vientos viajaron en direcciones del noreste y suroeste con velocidades máximas de 2.0 m/s y una frecuencia del 21% (Figura 4.18a), el día 04 de mayo los vientos soplaron en direcciones del noreste, oeste y un poco del noroeste, con velocidades de 0.1 hasta 2.0 m/s (Figura 4.18b), el día del máximo

de Ozono resultaron vientos de todas direcciones con velocidades de 0.1 a 2.0 m/s, lo cual originó la concentración de contaminantes en el sitio (Figura 4.18c).

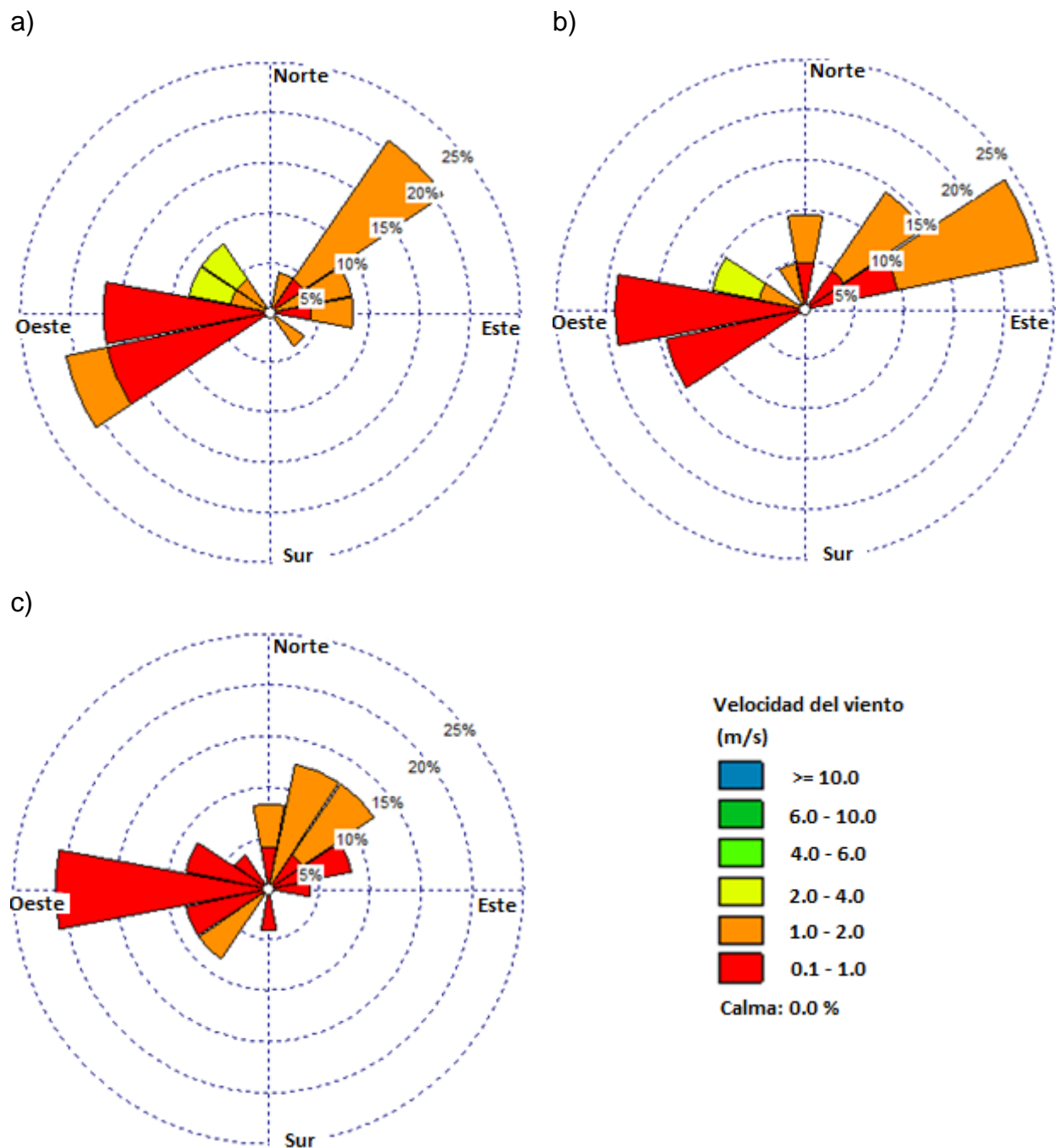


Figura 4.18 Rosas de los vientos observadas el: a) 03/05/2006, b) 04/05/2006 c) 05/05/2006.

### 4.5.2 Casos de concentraciones mínimas de Ozono

Los análisis de este tipo de casos permite analizar las condiciones ambientales que prevalecen cuando la concentración de Ozono es mínima, a diferencia de los casos anteriores. La Tabla 4.9 muestra los días analizados y sus características.

**Tabla 4.9** Casos de concentración mínima de Ozono.

Casos	Fecha	Sitio	IMECA	Concentración (ppb)	Calidad del aire
1	12/02/2002	TLA	15	17	<b>BUENA</b>
2	05/10/2005	XAL	12	13	<b>BUENA</b>
3	10/07/2006	MER	25	28	<b>BUENA</b>
4	14/09/2006	MER	20	22	<b>BUENA</b>

#### CASO 1

Se registraron 15 puntos IMECA de Ozono en el sitio de TLA, el día 12 de febrero de 2002.

En la Figura 4.19 se aprecia un decremento en la concentración de Ozono y en el día de su mínima concentración registró 17 ppb a las 17:00 horas. Por su parte el NO<sub>2</sub> presentó a lo largo de los 3 días concentraciones bajas ( $\approx 60$  ppb), a diferencia del NO<sub>x</sub> que en el día del mínimo de Ozono su concentración fue de 160 ppb. Para la concentración de los COV's totales no se registraron datos de muestreo. El parámetro meteorológico de temperatura tuvo una tendencia de decremento a lo largo de los 3 días de 23 a 15°C, esta última en el día del evento.

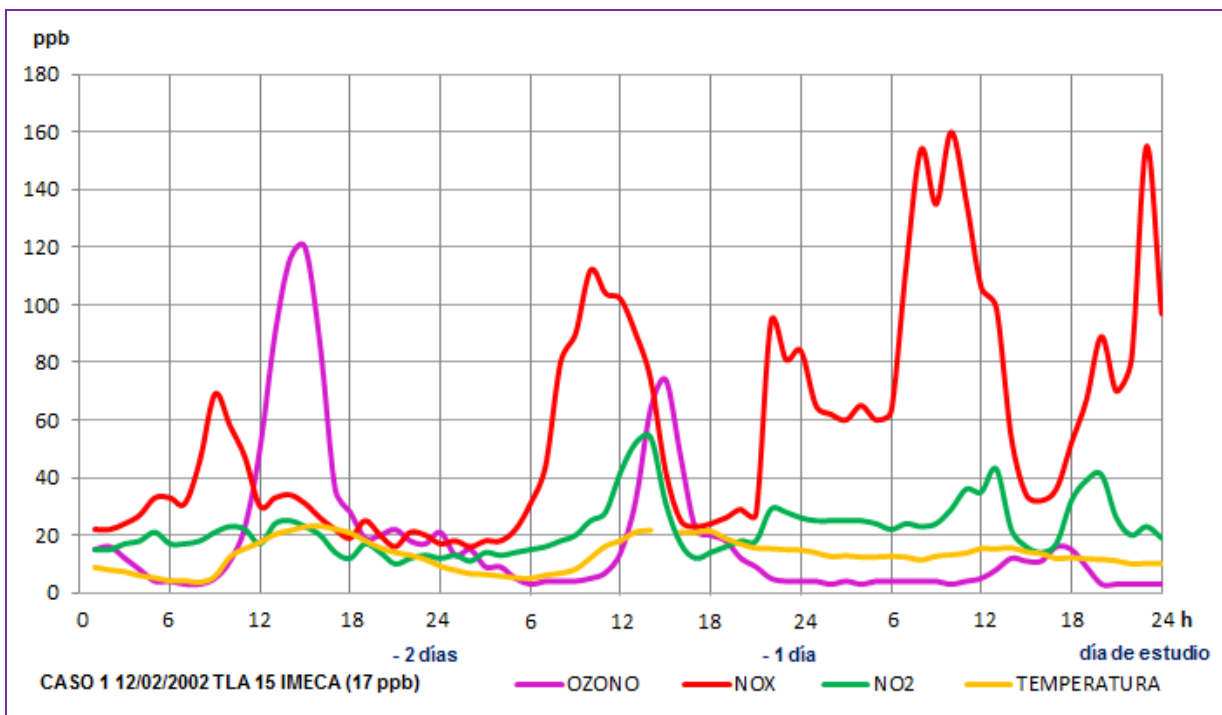


Figura 4.19 Tlalnepantla puntos15 IMECA (17 ppb).

En la Figura 4.20 pueden apreciarse las rosas de los vientos para este caso. El día 10 de febrero se presentaron vientos con velocidades de hasta 6.0 m/s con dirección hacia el noroeste (Figura 4.20a); el día 11 de febrero se caracterizó por un transporte de contaminantes del noroeste al sureste con velocidades altas de hasta 6.0 m/s (Figura 4.20b); el último día se registraron velocidades del viento hasta de 4 m/s, lo cual favoreció a la dispersión de los contaminantes, asimismo la temperatura se mantuvo baja lo cual significó una cantidad menor de energía para que las reacciones fotoquímicas ocurrieran. Esta situación produjo concentraciones mínimas de Ozono (Figura 4.20c).

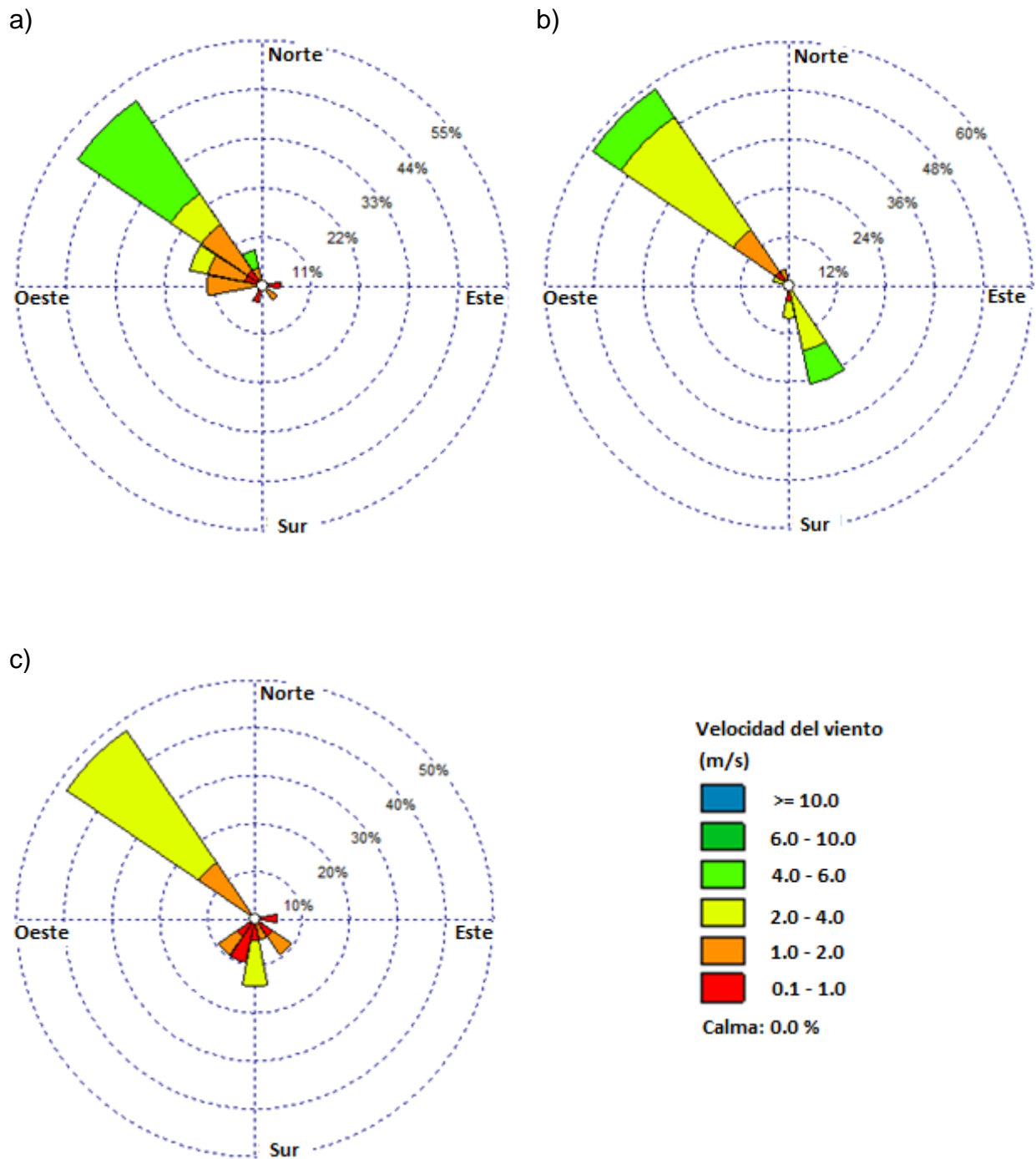
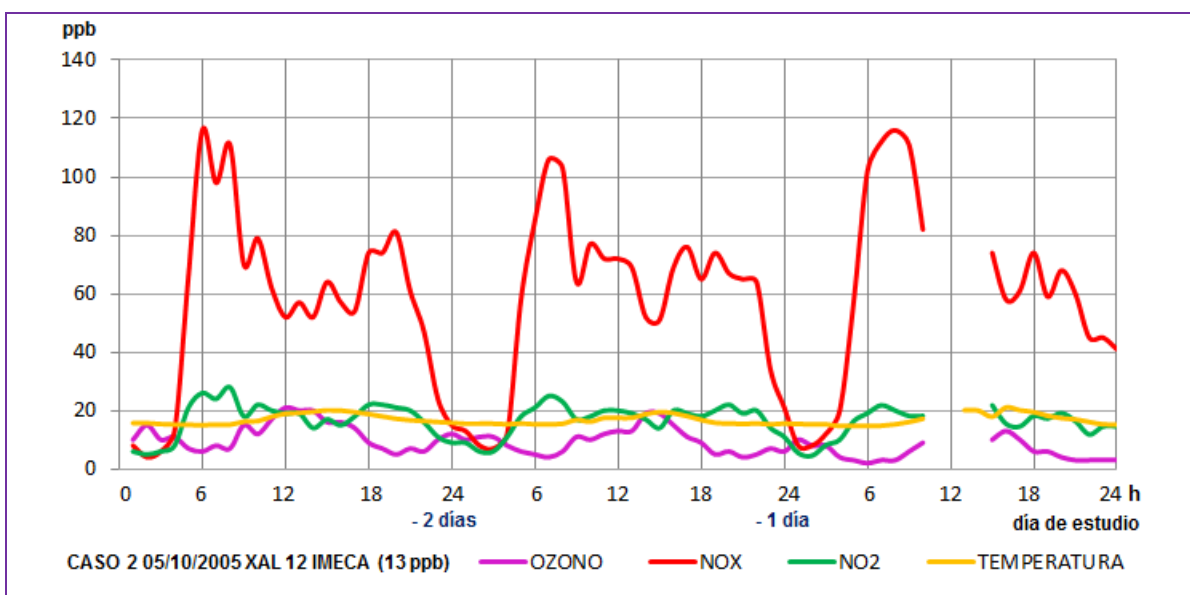


Figura 4.20 Rosas de los vientos observadas el: a) 10/02/2002, b) 11/02/2002 c) 12/02/2002.

## CASO 2

Referente a este caso, se registró el día 5 de octubre de 2005 con 12 puntos IMECA en el sitio de XAL ubicado al noreste de la ZMVM. El Ozono presentó la concentración mínima a las 16:00 horas, de 13 ppb; en los 2 días anteriores se registraron también concentraciones mínimas de 21 y 19 ppb respectivamente, el NO<sub>2</sub> mostró una concentración casi constante de 28 a 22 ppb a lo largo de los 3 días y el NO<sub>x</sub> presentó concentraciones un poco elevadas de 106 a 116 ppb. A lo largo de los 3 días no se registraron datos de muestreo para concentraciones de los COV's totales. La temperatura se mantuvo casi constante durante los 3 días y alcanzó los 21°C el día de estudio (Figura 4.21).



**Figura 4.21** Xalostoc 12 puntos IMECA (13 ppb).

La dirección del viento provino del norte con una velocidad máxima de hasta 6.0 m/s el día 03 de octubre (Figura 4.22a); el día 04 de octubre los vientos continuaron proviniendo del norte con velocidades de 2.0 hasta 6.0 m/s (Figura 4.22b); el día de la concentración mínima de Ozono, se registró una dirección del viento proveniente del noreste con velocidades de 2.0 m/s hasta 6.0 m/s (Figura



4.22c), estas condiciones propiciaron el transporte de contaminantes hacia el sur de la ZMVM.

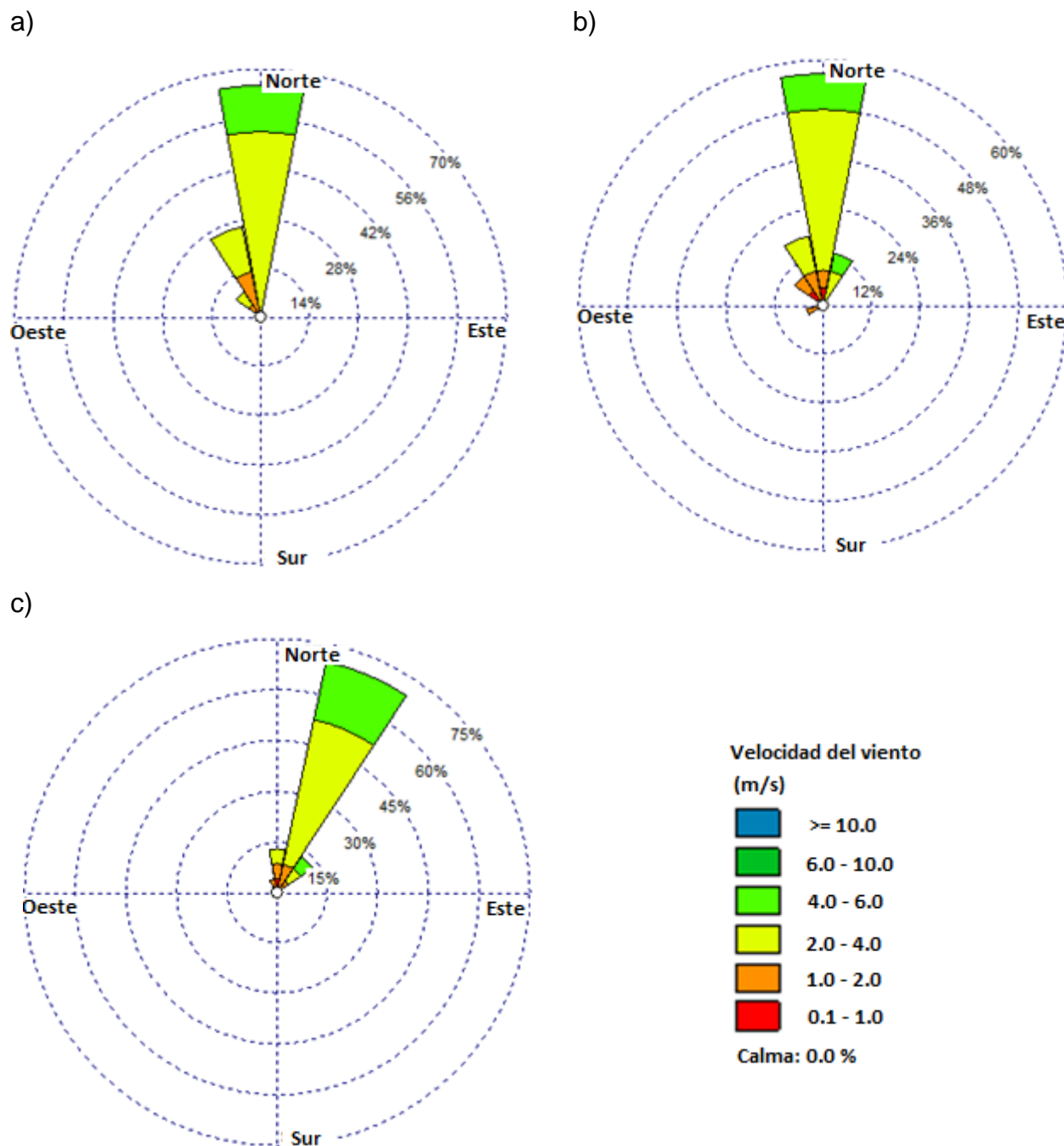


Figura 4.22 Rosas de los vientos observadas el: a) 03/10/2005, b) 04/10/2005 c) 05/10/2005.

### CASO 3

Este caso tuvo lugar el día 10 de junio de 2006 en el sitio de la MER (centro de la ZMVM) que registró 25 puntos IMECA. Como se muestra en la Figura 4.23, el Ozono presentó un decremento en su concentración a lo largo de los 3 días, de 68 a 28 ppb. Las concentraciones del NO<sub>2</sub> y NO<sub>x</sub> fueron relativamente elevadas, de 134 ppb y 146 ppb respectivamente, en el día del evento. La concentración de los COV's totales registró 1194 ppbC en el día del mínimo de Ozono, para los 2 días anteriores no hubo datos de muestreo, entre las especies con mayor concentración se encontraron el PROPA, PROPIL, nBUTA, NONA y DECA. Referente a la meteorología, la temperatura disminuyó a lo largo de los 3 días de 25 a 20°C.

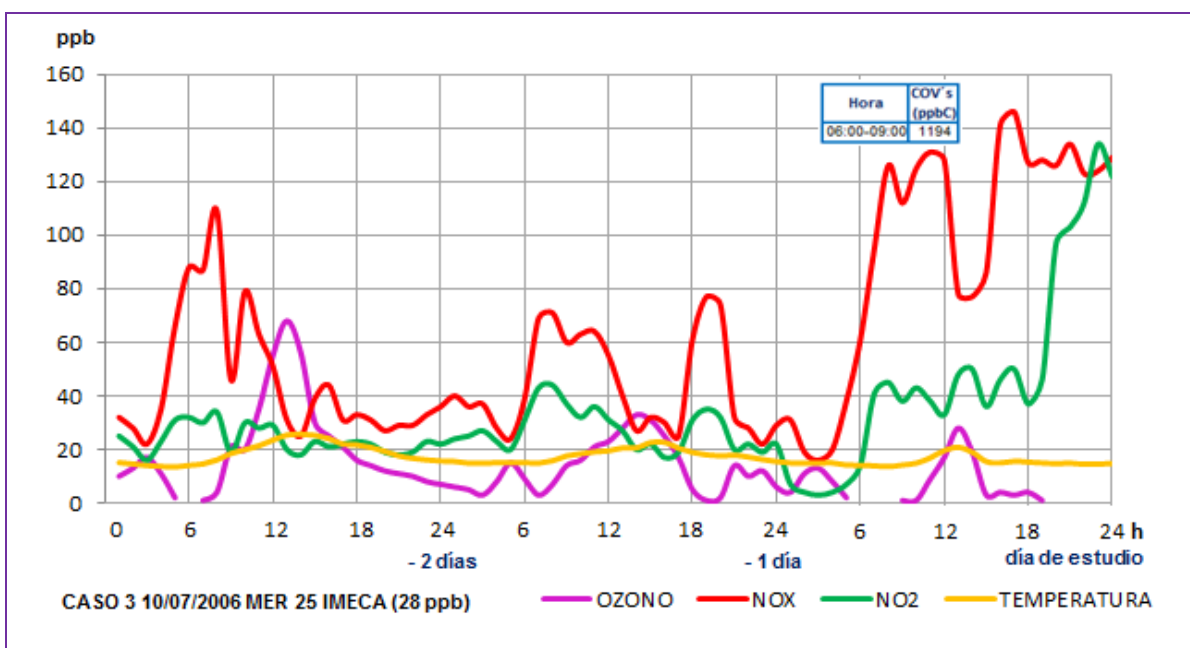
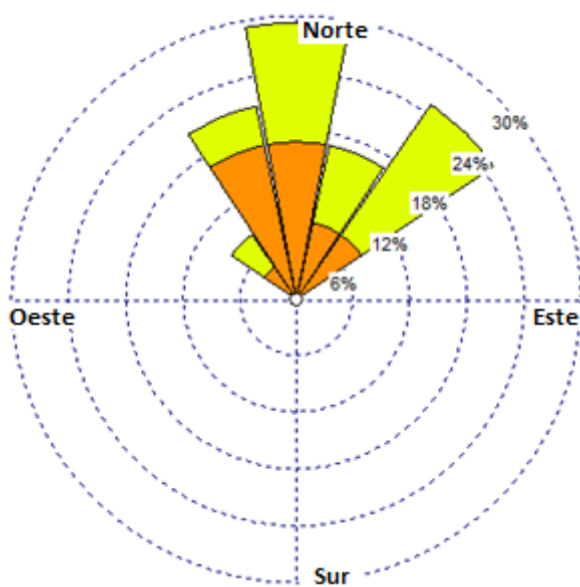


Figura 4.23 Merced 25 puntos IMECA (28 ppb).

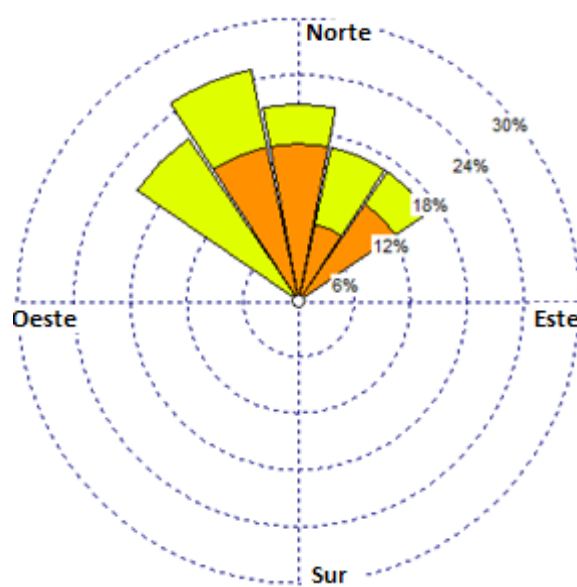
El día 08 de julio los vientos provinieron del norte y noreste predominando velocidades de hasta 4.0 m/s del noreste (Figura 4.24a), el día 09 de julio los vientos igualmente provinieron del noreste y noroeste, velocidades de 1.0 hasta 4.0 m/s, en el día de la concentración mínima de Ozono los vientos dominantes

del noreste provinieron del noroeste con velocidades de 1.0 hasta 4.0 m/s (Figura 4.24c), lo cual originó una situación de calidad buena del aire para el sitio de la MER.

a)



b)



c)

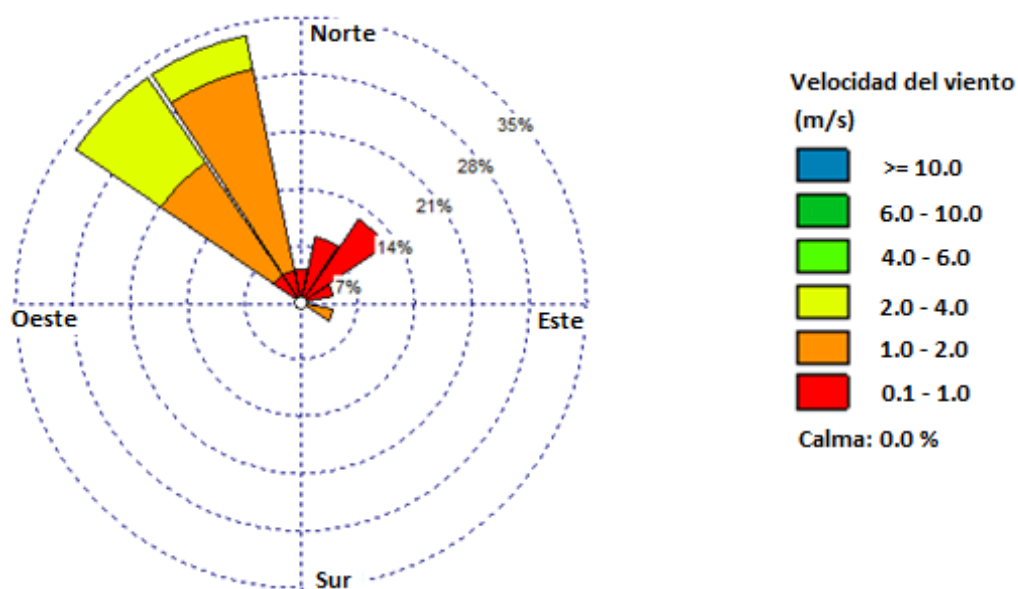


Figura 4.24 Rosas de los vientos observadas el: a) 08/07/2006, b) 09/07/2006 c) 10/07/2006.

## CASO 4

Este caso se registró con 20 puntos IMECA, el día 14 de septiembre de 2006 en el sitio de la MER (C de la ZMVM). A lo largo de los 3 días el Ozono mantuvo una tendencia de decremento en su concentración de 60 a 20 ppb, esta última en el día de estudio. El  $\text{NO}_2$  presentó concentraciones bajas a lo largo de los 3 días de 30 a 50 ppb, mientras el  $\text{NO}_x$  registró concentraciones altas de 115 a 178 ppb. En cuanto a los COV's totales, su concentración fue de 955 ppbC en el día del mínimo de Ozono, ya que en los 2 días anteriores no existió muestreo de COV's. Se identificó al ETILE, PROPA, nBUTA, NONA, PROPIL como aquellas especies de mayor concentración. La temperatura descendió a lo largo de los 3 días de 26 a 23°C (Figura 4.25).

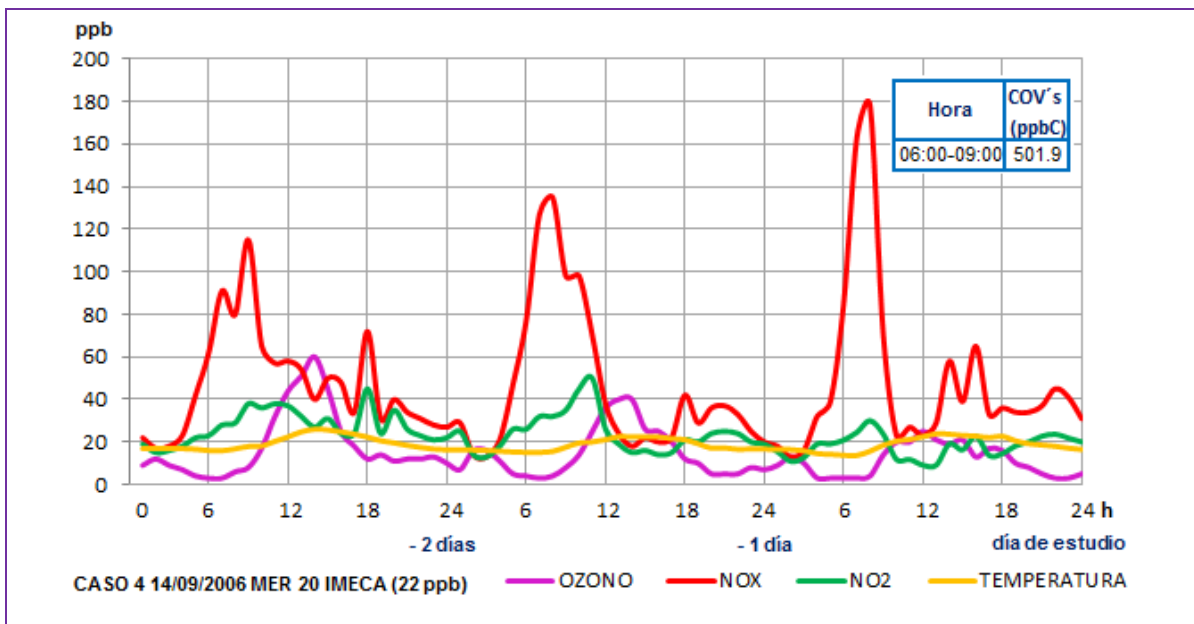


Figura 4.25 Merced 20 puntos IMECA (22 ppb).

En las rosas de los vientos para este caso, en el día 12 de septiembre se presentaron vientos provenientes del norte con velocidades de 1.0 hasta 4.0 m/s (Figura 4.26a), el día 13 de septiembre aunque la rosa presentó vientos encontrados en direcciones noroeste y sureste, predominaron los vientos del

sureste con velocidades de hasta 4.0 m/s (Figura 4.26b); el día 15 dominaron vientos que provinieron del sur y sureste con velocidades de 2.0 a 4.0 m/s (Figura 4.26c). Este es un caso en el que la dirección del viento dominante provino del sur, la cual es una zona con pocas emisiones de contaminantes y ocasionaron una buena calidad del aire en MER.

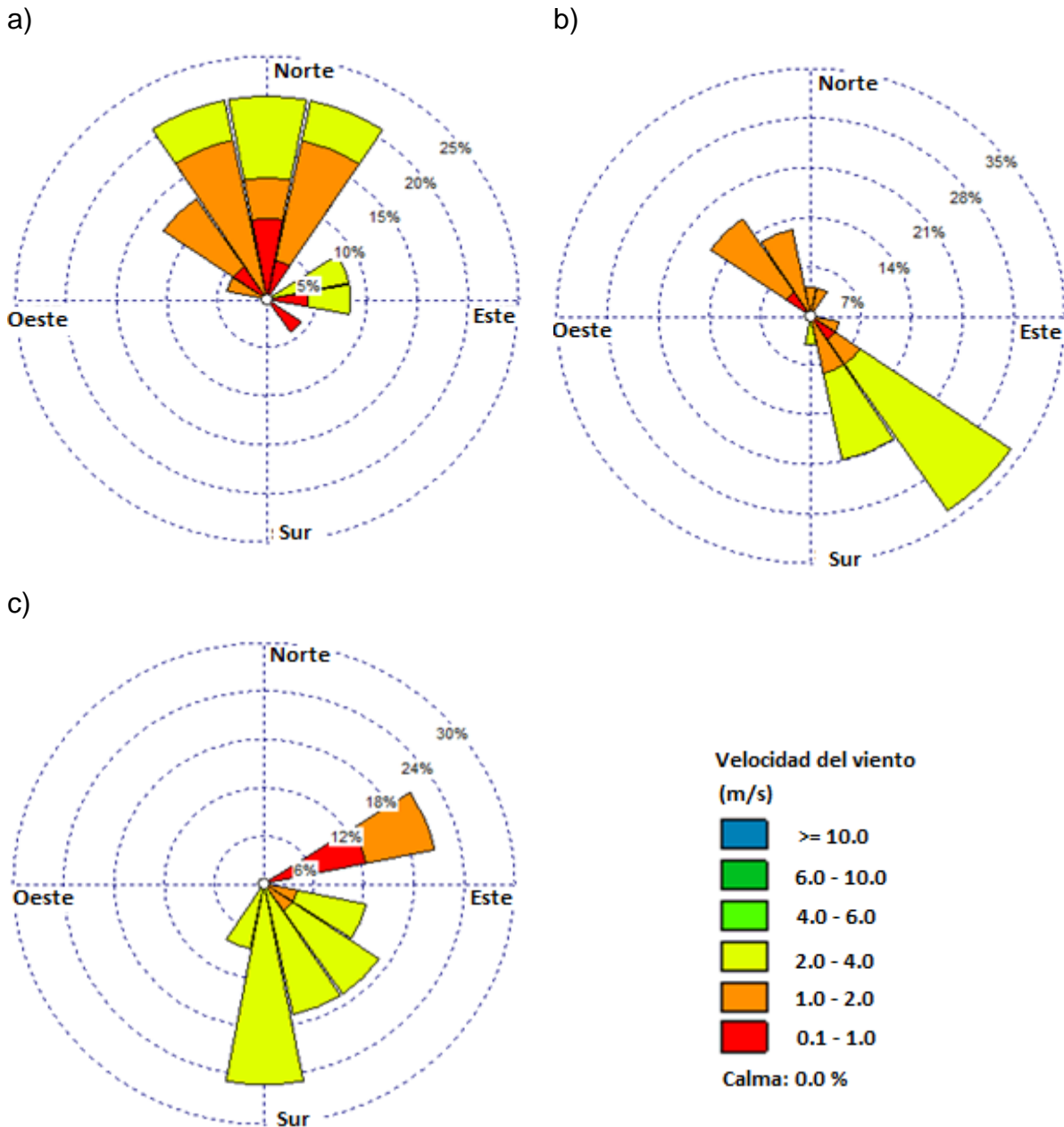


Figura 4.26 Rosas de los vientos observadas el: a) 12/09/2006, b) 13/09/2006 c) 14/09/2006.

## *Conclusiones y Recomendaciones*

De este trabajo se desprenden las siguientes conclusiones:

1. De acuerdo a los resultados de  $POCP_F$ , se concluye que las fuentes con mayor participación en la generación de Ozono son las emisiones de vehículos a gasolina ( $POCP_F = 150$  kton/año), las de los talleres de desengrasadoras ( $POCP_F = 30$  kton/año) y las de vehículos a diésel ( $POCP_F = 21$  kton/año). Estos resultados se explican por la magnitud de las emisiones (171 kton/año suma de autos a gasolina y diesel y de 30 kton/año de desengrasadoras) y por la abundancia de especies reactivas en estas emisiones.

En las fuentes móviles destacaron el m-p-xileno (0.15 % de m-p-xileno en el perfil de emisión), tolueno (0.09 % de tolueno en el perfil de emisión) y o-xileno (0.05 % de o-xileno en el perfil de emisión); mientras que en las emisiones de los talleres de desengrasadoras (fuentes de área) abundaron el tolueno (0.13 %), pentano (0.08 %) y el m-p-xileno (0.07 % de m-p-xileno en el perfil de emisión). Cabe mencionar que a la fecha no existe normatividad que regule las emisiones de este tipo de COV's por lo que los contaminantes son liberados a la atmósfera sin restricción.

2. Los COV's tienen orígenes diversos y su monitoreo no está contemplado de manera sistemática en la Red de Monitoreo Ambiental de la ZMVM, por lo que se constató que existen vacíos en la información cualitativa y cuantitativa de estos compuestos.
3. Se desarrollaron ecuaciones para estimar la concentración del oxidante en función de algunos COV's; explicando el 54% de las concentraciones de

Ozono en Xalostoc, el 39% en Merced, el 20% en Tlalnepantla y únicamente el 3% para el sitio del Pedregal. Esto demostró que la producción de Ozono no puede ser estimada en función únicamente de las concentraciones de compuestos orgánicos, por lo que, es imprescindible incluir aspectos de reactividad y meteorología, entre otros.

4. Se encontró que la fuente que libera COV's de alta reactividad (pentano, MTBE, 2-metil pentano, hexano y tolueno) es la llamada emisiones evaporativas o fugitivas de vehículos a gasolina, no está incluida en el IE por lo que no fue posible estimar el valor de  $POCP_F$ , sin embargo, se trata de una fuente con importante influencia en la contaminación por Ozono.
5. Otro factor importante en la contaminación por Ozono es sin duda la meteorología de superficie. Se encontró que los casos de concentración máxima de Ozono, con categorías de calidad del aire muy mala y extremadamente mala, sucedieron en días con condiciones de alta insolación (~22 a 29°C), direcciones de viento variadas y con velocidades bajas (0.1 a 4 m/s) que provocaron el estancamiento de los contaminantes, entre ellos los precursores de Ozono por lo que también se observó concentración elevada de  $NO_x$  (~ 426 ppb) y COV's (~2764 ppbC) en los días previos al máximo de Ozono. Estos casos se presentaron principalmente en los meses de febrero, abril y mayo.
6. Respecto a los casos de concentración mínima de Ozono (calidad del aire con categoría buena) se comprobó que la temperatura no fue elevada (entre 15 y 20°C), las concentraciones de  $NO_x$  y COV's fueron bajas (~178 ppb y 1194 ppbC respectivamente) y el viento mantuvo una sola dirección con velocidades mayores a 4 m/s, lo que provocó la dilución de los contaminantes. Los meses en que se presentaron estos casos correspondieron a julio, septiembre y octubre.

## ***Recomendaciones***

Con base en los resultados de esta investigación, se recomienda:

1. Incluir los compuestos orgánicos reactivos como el benceno, tolueno y xileno en la normatividad federal, ya que solo existe normatividad local para la ZMVM, particularmente vigilar las emisiones provenientes de fuentes móviles (tanto del escape como las que ocurren por evaporación) y en general de todo proceso o actividad que emplee compuestos orgánicos, como los talleres de desengrasadoras.
2. Agregar la medición sistemática de compuestos orgánicos volátiles en la Red de Monitoreo Atmosférico de la ZMVM y desde luego, que la información esté al alcance del público para fines académicos.
3. Promover e impulsar un programa cultural-educativo para preservar el medio ambiente en el cual participe toda la población.



## *Referencias Bibliográficas*

### **LIBROS, TESIS Y ARTÍCULOS**

- Carter W. P., Development of Ozone Reactivity Scales for Volatile Organic Compounds. Journal of the Air & Waste Management Association (1994), 44:7 881-899.
- Colin Baird, (2001). Química Ambiental. Editorial Reverte, España.
- Derwent, R.G., Jenkin, M. E., Saunders, S. M. 1996. Photochemical ozone creation potentials for a large of reactive hydrocarbons under European conditions. Atmospheric Environment 30 (1996) 181–199.
- Derwent, R.G., Jenkin, M. E., Saunders, S. M., Pilling, M. J. 1998. Photochemical ozone creation potentials for organic compounds in northwest Europe calculated with a master chemical mechanism. Atmospheric Environment 32 (1998) 2429–2441.
- Derwent, R.G., Jenkin, M. E., Passant, N. R., Pilling, M. J. 2007. Photochemical ozone creation potentials (POCPs) for different emission sources of organic compounds under European conditions estimated with a Master Chemical Mechanism. Atmospheric Environment 41 (2007) 2570–2579.
- García-Colín Leopoldo, Varela Ham Rubén (2001). Contaminación Atmosférica III. (1<sup>ra</sup> edición), México, D.F.: El Colegio Nacional.

- Gutiérrez H., Romeiu I., Fortool T., Corey G. (2001) Contaminación del aire; riesgos para la salud. (1<sup>ra</sup> edición) México, D.F.: El manual moderno, S.A. de C.V.
- Huerta Roldan J.M. (2013). Evaluación de los beneficios económicos obtenidos por reducción de Ozono en la ZMVM en el periodo de 1991-2011 considerando la movilidad de la población. Tesis de licenciatura en Ingeniería Industrial, UNAM.
- Jacobson Z. Mark, (2002). Atmospheric Pollution, History, Science and Regulation. Cambridge University Press, U.S.A.
- Jiménez B. Elena, (2012). La contaminación ambiental en México. Causas, efectos y tecnología apropiada. México, D.F. Editorial Limusa, S.A. de C.V.
- Molina T. Luisa, Molina J. Mario. (2002). Air Quality in the México Megacity; and Integrated Assessment. Cambridge, MA, U.S.A.: Klumber Academic Publishers.
- Seoanez Mariano, (2002). Tratado de contaminación atmosférica: Problemas, tratamiento y gestión. España. Ediciones Mundi-Prensa.
- Stanley E. Manahan. (2011). Introducción a la química ambiental. Editorial Reverte, 1ra reimpresión.
- Rodríguez Olivares J.G., Tenorio Márquez Y. M. (2006). Desarrollo de modelos pronósticos de la calidad del aire en la zona metropolitana de la ciudad de Guadalajara (ZMG), Jalisco. Tesis de licenciatura en Ingeniería Química Industrial. ESIQIE, IPN.

## **INTERNET**

- Granados G., Retama A. (2010). Calidad del aire en la Ciudad de México, informe 2010. Secretaría del Medio Ambiente del Gobierno del Distrito Federal. Disponible en: [www.aire.df.gob.mx/](http://www.aire.df.gob.mx/)
  
- Inventario de emisiones de contaminantes criterio 2006. Secretaría del Medio Ambiente del Gobierno del Distrito Federal. Disponible en: [www.aire.df.gob.mx/](http://www.aire.df.gob.mx/)
  
- Inventario de emisiones de la zona metropolitana del valle de México contaminantes criterio 2010. Secretaría del Medio Ambiente del Gobierno del Distrito Federal. Disponible en: [www.aire.df.gob.mx/](http://www.aire.df.gob.mx/)
  
- Jaimes Luis, Sandoval Julio, González Emmanuel, Zambrano Angel. "Experimental study of ozone-forming potencial from exhaust emissions of vehicules fuele with reformulated gasolina in México city". Revista internacional de contaminación ambintal, 2006, No. 4, Vol 22, pp. 165-172. Disponible en: <http://www.revistas.unam.mx/index.php/rica/article/view/21680>
  
- Jenkin M.E., Watson L.A., Utembe S.R. (2008) A Common Representative Intermediates (CRI) mechanism for VOC degradation. Part 1: Gas phase mechanism development. Disponible en: [www.elsevier.com/locate/atmosenv](http://www.elsevier.com/locate/atmosenv)
  
- Página electrónica del Sistema de Monitoreo Atmosférico de la Ciudad de México. (2016). Disponible en: <http://www.aire.cdmx.gob.mx/default.php>
  
- Página electrónica del Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático de la Ciudad de México. (2015). Disponible en: <https://www.gob.mx/inecc>

- Página electrónica de la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos de Norteamérica. (2016). Disponible en:<https://www.epa.gov/>
- Página electrónica del Centro Molina de Energía y Medio Ambiente de Estados Unidos de Norteamérica. (2016). Disponible en:  
<http://www.mce2.org/>
- Sánchez Gabriela, Vega Elizabeth, Reyes Elizabeth. Compuestos orgánicos volátiles en la Ciudad de México. Ciencia y desarrollo en internet, (2004). Recuperado el día 20 de octubre de 2016 en <http://www.conacyt.gob.mx/comunicacion/revista/ArticulosCompleto/pdf/COV.pdf>
- SMA-GDF, INE-DGCENICA y UAMI. 2008. Monitoreo y Evaluación de las concentraciones de compuestos orgánicos volátiles en la Zona Metropolitana de la Ciudad de México. México, D.F.

# *Anexo*

*Base de Datos para el Cálculo del  $POCP_F$  de  
COV's en la ZMVM*

*Desarrollo de la ecuación empírica de ajuste*

*Base de Datos para el Cálculo del POCP<sub>F</sub> de COV's en la ZMVM*

COV's	Aplicación de asfalto					Manejo y distribución de GLP				
	PE (%)	Emisión total IE (aplicación de asfalto) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP <sub>F</sub>	PE (%)	Emisión total IE (GLP) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP <sub>F</sub>
ETAN	0.01	199	1.25	12.3	0.15	0.01	64119	630.38	12.3	77.54
ETILE	0.03	199	5.74	100	5.74		64119	0.00	100	0.00
ACETIL	0.04	199	8.09	8.5	0.69		64119	0.00	8.5	0.00
PROPI	0.01	199	2.47	112.3	2.77	0.00	64119	276.60	112.3	310.62
PROPA	0.13	199	26.38	17.6	4.64	0.68	64119	43522.19	17.6	7659.90
iBUTA	0.03	199	6.51	30.7	2.00	0.12	64119	7764.01	30.7	2383.55
iBUTE	0.01	199	2.15	107.9	2.32	0.01	64119	521.03	107.9	562.19
NBUTA	0.07	199	14.40	35.2	5.07	0.16	64119	10484.95	35.2	3690.70
T2BUTE		199	0.00	113.2	0.00	0.01	64119	521.03	113.2	589.81
C2BUTE		199	0.00	114.6	0.00	0.00	64119	308.76	114.6	353.84
PENTA	0.02	199	4.34	39.5	1.72	0.00	64119	90.05	39.5	35.57
1PENTE		199	0.00	97.7	0.00		64119	0.00	97.7	0.00
ISOPRE		199	0.00	40.5	0.00		64119	0.00	40.5	0.00
T2PENTE		199	0.00	111.7	0.00		64119	0.00	111.7	0.00
C2PENTE		199	0.00	112.1	0.00		64119	0.00	112.1	0.00
2M2BUTE		199	0.00		0.00		64119	0.00		0.00
MTBE	0.02	199	3.22		0.00		64119	0.00		0.00
22MBUTA	0.00	199	0.55	24.1	0.13		64119	0.00	24.1	0.00
CPENTA		199	0.00		0.00		64119	0.00		0.00
2MPENTA	0.02	199	3.49	42	1.47		64119	0.00	42	0.00
3MPENTA		199	0.00	47.9	0.00		64119	0.00	47.9	0.00
HEXA	0.03	199	5.32	48.2	2.56		64119	0.00	48.2	0.00
MC PENTA	0.00	199	0.80		0.00		64119	0.00		0.00
24MPENTA	0.00	199	0.52		0.00		64119	0.00		0.00
BENCE	0.01	199	1.72	21.8	0.38		64119	0.00	21.8	0.00
CHEXA		199	0.00		0.00		64119	0.00		0.00
2MHEXA	0.01	199	1.22	41.1	0.50		64119	0.00	41.1	0.00
23MPENTA	0.00	199	0.70		0.00		64119	0.00		0.00
3MHEXA	0.01	199	1.70	36.4	0.62		64119	0.00	36.4	0.00
224MPENTA	0.01	199	2.75		0.00		64119	0.00		0.00
HEPTA	0.01	199	1.15	49.4	0.57		64119	0.00	49.4	0.00
MHEXA	0.00	199	0.57		0.00		64119	0.00		0.00
234MPENTA	0.01	199	1.25		0.00		64119	0.00		0.00
TOLUE	0.08	199	16.87	63.7	10.75		64119	0.00	63.7	0.00
2MHEPTA	0.00	199	0.50		0.00		64119	0.00		0.00
OCTA	0.01	199	1.15	45.3	0.52		64119	0.00	45.3	0.00
25MHEXA		199	0.00	41.1	0.00		64119	0.00	41.1	0.00
EBENCE	0.05	199	9.18	73	6.71		64119	0.00	73	0.00
mpXILE	0.18	199	35.32	105.9	37.40		64119	0.00	105.9	0.00
ESTIRE	0.00	199	0.65		0.00		64119	0.00		0.00
oXILE	0.05	199	10.93	105.3	11.51		64119	0.00	105.3	0.00
NONA	0.01	199	2.67	41.4	1.11		64119	0.00	41.4	0.00
IPBENCE	0.00	199	0.57	50	0.29		64119	0.00	50	0.00
nPBENCE	0.01	199	1.15	63.6	0.73		64119	0.00	63.6	0.00
135MBENCE	0.01	199	2.62	138.1	3.62		64119	0.00	138.1	0.00
mETOLUE	0.01	199	2.15	101.9	2.19		64119	0.00	101.9	0.00
124MBENCE	0.02	199	3.92	127.8	5.01		64119	0.00	127.8	0.00
DECA	0.03	199	6.44	38.4	2.47		64119	0.00	38.4	0.00
nUNDECA	0.04	199	8.59	38.4	3.30		64119	0.00	38.4	0.00
<b>TOTAL</b>	1.00		199.00	<b>ton/año</b>	<b>116.9</b>	1.00		64119.00	<b>ton/año</b>	<b>15664</b>
				<b>kton/año</b>	<b>0.1</b>				<b>kton/año</b>	<b>16</b>

Anexo (continuación)...

COV's	Tintorerías a percloroetileno					Tintorerías que usan otros disolventes				
	PE (%)	Emisión total IE (lavado en seco) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F	PE (%)	Emisión total IE (lavado en seco) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F
ETAN		6967	0.00	12.3	0.00		6967	0.00	12.3	0.00
ETILE		6967	0.00	100	0.00		6967	0.00	100	0.00
ACETIL	0.00	6967	23.94	8.5	2.04		6967	0.00	8.5	0.00
PROFIL		6967	0.00	112.3	0.00	0.00	6967	3.42	112.3	3.84
PROPA	0.01	6967	47.88	17.6	8.43	0.00	6967	10.25	17.6	1.80
iBUTA	0.00	6967	23.94	30.7	7.35	0.00	6967	2.28	30.7	0.70
iBUTE		6967	0.00	107.9	0.00	0.00	6967	7.97	107.9	8.60
NBUTA		6967	0.00	35.2	0.00	0.00	6967	11.39	35.2	4.01
T2BUTE		6967	0.00	113.2	0.00		6967	0.00	113.2	0.00
C2BUTE		6967	0.00	114.6	0.00		6967	0.00	114.6	0.00
PENTA	0.03	6967	215.47	39.5	85.11	0.00	6967	10.25	39.5	4.05
1PENTE		6967	0.00	97.7	0.00		6967	0.00	97.7	0.00
ISOPRE	0.00	6967	23.94	40.5	9.70		6967	0.00	40.5	0.00
T2PENTE		6967	0.00	111.7	0.00		6967	0.00	111.7	0.00
C2PENTE		6967	0.00	112.1	0.00		6967	0.00	112.1	0.00
2M2BUTE		6967	0.00		0.00	0.00	6967	2.28		0.00
MTBE		6967	0.00		0.00	0.06	6967	392.94		0.00
22MBUTA		6967	0.00	24.1	0.00	0.03	6967	174.26	24.1	42.00
CPENTA		6967	0.00		0.00	0.00	6967	6.83		0.00
2MPENTA	0.02	6967	119.71	42	50.28	0.32	6967	2239.19	42	940.46
3MPENTA	0.01	6967	95.77	47.9	45.87		6967	0.00	47.9	0.00
HEXA	0.03	6967	191.53	48.2	92.32	0.39	6967	2702.74	48.2	1302.72
MCPENTA	0.01	6967	47.88		0.00	0.01	6967	67.20		0.00
24MPENTA		6967	0.00		0.00	0.00	6967	2.28		0.00
BENCE	0.08	6967	550.66	21.8	120.04	0.00	6967	4.56	21.8	0.99
CHEXA	0.00	6967	23.94		0.00		6967	0.00		0.00
2MHEXA	0.00	6967	23.94	41.1	9.84		6967	0.00	41.1	0.00
23MPENTA		6967	0.00		0.00		6967	0.00		0.00
3MHEXA	0.01	6967	47.88	36.4	17.43		6967	0.00	36.4	0.00
224MPENTA		6967	0.00		0.00	0.00	6967	1.14		0.00
HEPTA	0.01	6967	71.82	49.4	35.48	0.00	6967	1.14	49.4	0.56
MCHEXA	0.01	6967	47.88		0.00		6967	0.00		0.00
234MPENTA		6967	0.00		0.00		6967	0.00		0.00
TOLUE	0.66	6967	4572.84	63.7	2912.90	0.00	6967	7.97	63.7	5.08
2MHEPTA		6967	0.00		0.00		6967	0.00		0.00
OCTA		6967	0.00	45.3	0.00	0.00	6967	9.11	45.3	4.13
25MHEXA		6967	0.00	41.1	0.00	0.00	6967	2.28	41.1	0.94
EBENCE	0.00	6967	23.94	73	17.48	0.00	6967	9.11	73	6.65
mpXILE	0.04	6967	263.36	105.9	278.90	0.00	6967	22.78	105.9	24.12
ESTIRE	0.03	6967	239.42		0.00	0.00	6967	10.25		0.00
oXILE	0.01	6967	47.88	105.3	50.42	0.01	6967	39.86	105.3	41.98
NONA	0.03	6967	215.47	41.4	89.21	0.05	6967	361.05	41.4	149.47
IPBENCE	0.00	6967	23.94	50	11.97	0.00	6967	5.69	50	2.85
nPBENCE		6967	0.00	63.6	0.00	0.00	6967	15.95	63.6	10.14
135MBENCE	0.00	6967	23.94	138.1	33.06	0.01	6967	96.81	138.1	133.70
mETOLUE		6967	0.00	101.9	0.00	0.01	6967	99.09	101.9	100.97
124MBENCE		6967	0.00	127.8	0.00	0.02	6967	130.98	127.8	167.39
DECA		6967	0.00	38.4	0.00	0.06	6967	439.64	38.4	168.82
nUNDECA		6967	0.00	38.4	0.00	0.01	6967	76.31	38.4	29.30
<b>TOTAL</b>	1.00		6967.00	<b>ton/año</b>	<b>3878</b>	1.00		6967.00	<b>ton/año</b>	<b>3155</b>
				<b>kton/año</b>	<b>4</b>				<b>kton/año</b>	<b>3</b>

Anexo (continuación)...

COV's	Relleno sanitario					Emisiones de vehículos por evaporación				
	PE (%)	Emisión total IE (relleno sanitario) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F	PE (%)	Emisión total IE (no incluido) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F
ETAN		10497	0.00	12.3	0.00	0.00			12.3	
ETILE	0.01	10497	66.05	100	66.05	0.01			100	
ACETIL	0.01	10497	129.24	8.5	10.99	0.01			8.5	
PROPIL	0.01	10497	129.24	112.3	145.13	0.00			112.3	
PROPA	0.07	10497	684.96	17.6	120.55	0.00			17.6	
iBUTA	0.02	10497	188.11	30.7	57.75	0.01			30.7	
iBUTE		10497	0.00	107.9	0.00	0.00			107.9	
NBUTA	0.05	10497	496.85	35.2	174.89	0.05			35.2	
T2BUTE		10497	0.00	113.2	0.00	0.01			113.2	
C2BUTE		10497	0.00	114.6	0.00	0.01			114.6	
PENTA	0.04	10497	419.31	39.5	165.63	0.24			39.5	
1PENTE		10497	0.00	97.7	0.00	0.01			97.7	
ISOPRE		10497	0.00	40.5	0.00	0.00			40.5	
T2PENTE		10497	0.00	111.7	0.00	0.02			111.7	
C2PENTE		10497	0.00	112.1	0.00	0.01			112.1	
2M2BUTE		10497	0.00		0.00	0.02				
MTBE	0.01	10497	136.42		0.00	0.11				
22MBUTA		10497	0.00	24.1	0.00	0.01			24.1	
CPENTA		10497	0.00		0.00	0.01				
2MPENTA	0.02	10497	165.14	42	69.36	0.08			42	
3MPENTA		10497	0.00	47.9	0.00	0.04			47.9	
HEXA	0.01	10497	136.42	48.2	65.75	0.05			48.2	
MCPENTA	0.00	10497	50.26		0.00	0.02				
24MPENTA		10497	0.00		0.00	0.01				
BENCE	0.01	10497	97.65	21.8	21.29	0.02			21.8	
CHEXA		10497	0.00		0.00	0.00				
2MHEXA	0.01	10497	68.93	41.1	28.33	0.01			41.1	
23MPENTA		10497	0.00		0.00	0.01				
3MHEXA	0.01	10497	96.21	36.4	35.02	0.01			36.4	
224MPENTA	0.01	10497	143.60		0.00	0.04				
HEPTA	0.01	10497	71.80	49.4	35.47	0.01			49.4	
MCHExA		10497	0.00		0.00	0.01				
234MPENTA	0.00	10497	50.26		0.00	0.02				
TOLUE	0.06	10497	614.60	63.7	391.50	0.04			63.7	
2MHEPTA		10497	0.00		0.00	0.00				
OCTA	0.01	10497	54.57	45.3	24.72	0.00			45.3	
25MHEXA		10497	0.00	41.1	0.00	0.00			41.1	
EBENCE	0.09	10497	993.70	73	725.40	0.01			73	
mpXILE	0.36	10497	3802.47	105.9	4026.82	0.03			105.9	
ESTIRE	0.13	10497	1398.64		0.00	0.00				
oXILE		10497	0.00	105.3	0.00	0.01			105.3	
NONA		10497	0.00	41.4	0.00	0.00			41.4	
IPBENCE	0.01	10497	84.72	50	42.36	0.00			50	
nPBENCE		10497	0.00	63.6	0.00	0.00			63.6	
135MBENCE		10497	0.00	138.1	0.00	0.00			138.1	
mETOLUE	0.01	10497	87.59	101.9	89.26	0.01			101.9	
124MBENCE	0.01	10497	153.65	127.8	196.36	0.01			127.8	
DECA	0.01	10497	119.19	38.4	45.77	0.00			38.4	
nUNDECA	0.01	10497	57.44	38.4	22.06	0.00			38.4	
<b>TOTAL</b>	1.00		10497.00	<b>ton/año</b>	<b>6560</b>	1.00		0.00	<b>ton/año</b>	<b>0</b>
				<b>kton/año</b>	<b>7</b>				<b>kton/año</b>	<b>0</b>



Anexo (continuación)...

COV's	Emisiones de vehículos a gasolina					Emisiones de vehículos a diesel				
	PE (%)	Emisión total IE (Fuentes móviles) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F	PE (%)	Emisión total IE (Fuentes móviles) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F
ETAN	0.02	325613	5195.02	12.3	638.99	0.01	39393	335.40	12.3	41.25
ETILE	0.05	325613	15629.12	100	15629.12	0.03	39393	1179.50	100	1179.50
ACETIL	0.11	325613	35264.69	8.5	2997.50	0.03	39393	1246.58	8.5	105.96
PROPI	0.03	325613	8585.06	112.3	9641.02	0.02	39393	793.79	112.3	891.42
PROPA	0.05	325613	15321.08	17.6	2696.51	0.09	39393	3667.07	17.6	645.40
iBUTA	0.01	325613	4314.57	30.7	1324.57	0.03	39393	1157.14	30.7	355.24
iBUTE	0.00	325613	0.00	107.9	0.00	0.00	39393	61.49	107.9	66.35
NBUTA	0.04	325613	13692.24	35.2	4819.67	0.06	39393	2431.67	35.2	855.95
T2BUTE	0.00	325613	1188.72	113.2	1345.63	0.00	39393	83.85	113.2	94.92
C2BUTE	0.00	325613	1012.62	114.6	1160.46	0.00	39393	83.85	114.6	96.09
PENTA	0.04	325613	11843.24	39.5	4678.08	0.03	39393	1106.83	39.5	437.20
1PENTE	0.00	325613	968.59	97.7	946.32	0.00	39393	67.08	97.7	65.54
ISOPRE	0.10	325613	31127.21	40.5	12606.52	0.12	39393	4606.19	40.5	1865.51
T2PENTE	0.00	325613	0.00	111.7	0.00	0.00	39393	156.52	111.7	174.83
C2PENTE	0.00	325613	0.00	112.1	0.00	0.00	39393	50.31	112.1	56.40
2M2BUTE	0.01	325613	2421.52		0.00	0.01	39393	218.01		0.00
MTBE	0.01	325613	3390.13		0.00	0.06	39393	2174.52		0.00
22MBUTA	0.00	325613	616.39	24.1	148.55	0.01	39393	525.46	24.1	126.64
CPENTA	0.00	325613	0.00		0.00	0.00	39393	0.00		0.00
2MPENTA	0.04	325613	11887.59	42	4992.79	0.03	39393	1341.61	42	563.48
3MPENTA	0.02	325613	7088.55	47.9	3395.42	0.04	39393	1531.67	47.9	733.67
HEXA	0.03	325613	9289.99	48.2	4477.78	0.04	39393	1498.13	48.2	722.10
MCPENTA	0.00	325613	396.26		0.00	0.00	39393	117.39		0.00
24MPENTA	0.01	325613	2905.89		0.00	0.01	39393	212.42		0.00
BENCE	0.03	325613	10699.00	21.8	2332.38	0.02	39393	955.90	21.8	208.39
CHEXA	0.01	325613	3390.23		0.00	0.00	39393	100.62		0.00
2MHEXA	0.01	325613	3918.59	41.1	1610.54	0.01	39393	329.81	41.1	135.55
23MPENTA	0.01	325613	3478.31		0.00	0.01	39393	201.24		0.00
3MHEXA	0.01	325613	4314.88	36.4	1570.61	0.01	39393	419.25	36.4	152.61
224MPENTA	0.05	325613	17171.50		0.00	0.00	39393	156.52		0.00
HEPTA	0.01	325613	3962.66	49.4	1957.56	0.01	39393	346.58	49.4	171.21
MCHExA	0.01	325613	1805.22		0.00	0.00	39393	89.44		0.00
234MPENTA	0.02	325613	6824.63		0.00	0.00	39393	167.70		0.00
TOLUE	0.09	325613	29720.26	63.7	18931.81	0.01	39393	357.76	63.7	227.89
2MHEPTA	0.01	325613	1893.30		0.00	0.00	39393	106.21		0.00
OCTA	0.01	325613	2597.79	45.3	1176.80	0.00	39393	167.70	45.3	75.97
25MHEXA	0.00	325613	396.27	41.1	162.87	0.00	39393	0.00	41.1	0.00
EBENCE	0.02	325613	6208.31	73	4532.07	0.04	39393	1459.00	73	1065.07
mpXILE	0.07	325613	21442.95	105.9	22708.08	0.15	39393	5970.16	105.9	6322.40
ESTIRE	0.00	325613	1188.83		0.00	0.01	39393	212.42		0.00
oXILE	0.03	325613	8277.82	105.3	8716.55	0.05	39393	2152.16	105.3	2266.23
NONA	0.01	325613	2509.77	41.4	1039.05	0.01	39393	307.45	41.4	127.29
IPBENCE	0.00	325613	792.56	50	396.28	0.00	39393	78.26	50	39.13
nPBENCE	0.01	325613	1629.16	63.6	1036.15	0.00	39393	134.16	63.6	85.33
135MBENCE	0.01	325613	3214.30	138.1	4438.95	0.01	39393	251.55	138.1	347.39
mETOLUE	0.02	325613	5503.95	101.9	5608.53	0.01	39393	313.04	101.9	318.99
124MBENCE	0.00	325613	1364.98	127.8	1744.45	0.01	39393	380.12	127.8	485.80
DECA	0.00	325613	924.67	38.4	355.07	0.00	39393	39.13	38.4	15.03
nUNDECA	0.00	325613	264.19	38.4	101.45	0.00	39393	50.31	38.4	19.32
<b>TOTAL</b>	1.00		325632.61	<b>ton/año</b>	<b>149918</b>	1.00		39393.00	<b>ton/año</b>	<b>21141</b>
				<b>kton/año</b>	<b>150</b>				<b>kton/año</b>	<b>21</b>

Anexo (continuación)...

COV's	Uso de desengrasantes en el sur y norte de la ciudad							Talleres de serigrafía				
	DES SUR	DES NOR	PE (%)	Emisión total IE (uso de disolventes) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCPF	PÉ (%)	Emisión total IE (artes gráficas) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCPF
ETAN	0.04		0.02	63152	1346.82	12.3	165.66		7999	0.00	12.3	0.00
ETILE		0.09	0.05	63152	2987.09	100	2987.09		7999	0.00	100	0.00
ACETIL			0.00	63152	0.00	8.5	0.00		7999	0.00	8.5	0.00
PROFIL	0.04	0.01	0.03	63152	1725.85	112.3	1938.12	0.00	7999	10.51	112.3	11.81
PROPA	0.04	0.08	0.06	63152	3942.25	17.6	693.84	0.00	7999	19.12	17.6	3.36
iBUTA	0.01	0.03	0.02	63152	1322.26	30.7	405.93	0.00	7999	34.41	30.7	10.56
iBUTE			0.00	63152	0.00	107.9	0.00	0.02	7999	155.79	107.9	168.10
NBUTA	0.07	0.09	0.08	63152	4961.22	35.2	1746.35	0.03	7999	201.67	35.2	70.99
T2BUTE			0.00	63152	0.00	113.2	0.00	0.00	7999	9.56	113.2	10.82
C2BUTE			0.00	63152	0.00	114.6	0.00	0.00	7999	12.43	114.6	14.24
PENTA	0.07	0.09	0.08	63152	4876.32	39.5	1926.14	0.09	7999	694.86	39.5	274.47
1PENTE			0.00	63152	0.00	97.7	0.00	0.00	7999	19.12	97.7	18.68
ISOPRE		0.01	0.00	63152	256.40	40.5	103.84		7999	0.00	40.5	0.00
T2PENTE	0.00	0.00	0.00	63152	298.55	111.7	333.48	0.01	7999	46.83	111.7	52.31
C2PENTE			0.00	63152	0.00	112.1	0.00	0.00	7999	23.89	112.1	26.79
2M2BUTE	0.01	0.00	0.01	63152	334.97		0.00	0.01	7999	51.61		0.00
MTBE	0.02	0.03	0.03	63152	1777.43		0.00	0.03	7999	221.74		0.00
22MBUTA	0.01	0.01	0.01	63152	490.84	24.1	118.29	0.01	7999	88.89	24.1	21.42
CPENTA		0.01	0.00	63152	175.21		0.00	0.01	7999	41.10		0.00
2MPENTA	0.04	0.05	0.04	63152	2666.94	42	1120.12	0.08	7999	637.51	42	267.75
3MPENTA		0.03	0.01	63152	841.86	47.9	403.25	0.07	7999	525.68	47.9	251.80
HEXA	0.04	0.03	0.03	63152	2185.36	48.2	1053.34	0.08	7999	615.53	48.2	296.68
MCPENTA	0.01	0.01	0.01	63152	660.82		0.00	0.01	7999	88.89		0.00
24MPENTA	0.01	0.01	0.01	63152	470.58		0.00	0.01	7999	61.17		0.00
BENCE	0.02	0.04	0.03	63152	1837.25	21.8	400.52	0.01	7999	89.84	21.8	19.59
CHEXA	0.01		0.00	63152	208.99		0.00	0.00	7999	29.63		0.00
2MHEXA	0.02	0.01	0.01	63152	829.51	41.1	340.93	0.01	7999	100.36	41.1	41.25
23MPENTA	0.01	0.01	0.01	63152	650.60		0.00	0.01	7999	106.09		0.00
3MHEXA	0.02	0.01	0.02	63152	1022.91	36.4	372.34	0.01	7999	106.09	36.4	38.62
224MPENTA	0.07	0.04	0.06	63152	3543.18		0.00	0.05	7999	433.93		0.00
HEPTA	0.02	0.01	0.02	63152	954.54	49.4	471.54	0.01	7999	94.62	49.4	46.74
MCHEXA	0.01		0.01	63152	366.89		0.00	0.00	7999	39.19		0.00
234MPENTA	0.03	0.02	0.02	63152	1396.32		0.00	0.02	7999	179.69		0.00
TOLUE	0.09	0.17	0.13	63152	8050.77	63.7	5128.34	0.22	7999	1764.39	63.7	1123.91
2MHEPTA	0.01		0.00	63152	218.28		0.00	0.01	7999	40.14		0.00
OCTA	0.01	0.01	0.01	63152	529.28	45.3	239.76	0.01	7999	51.61	45.3	23.38
25MHEXA			0.00	63152	0.00	41.1	0.00		7999	0.00	41.1	0.00
EBENCE	0.04	0.02	0.03	63152	1892.88	73	1381.80	0.03	7999	229.39	73	167.45
mpXILE	0.08	0.05	0.07	63152	4294.69	105.9	4548.08	0.10	7999	809.55	105.9	857.32
ESTIRE		0.01	0.01	63152	363.24		0.00	0.00	7999	5.73		0.00
oXILE	0.03	0.02	0.02	63152	1434.23	105.3	1510.25	0.04	7999	288.65	105.3	303.95
NONA	0.03	0.01	0.02	63152	1123.93	41.4	465.31	0.01	7999	41.10	41.4	17.01
IPBENCE	0.01		0.00	63152	157.90	50	78.95	0.00	7999	1.91	50	0.96
nPBENCE			0.00	63152	0.00	63.6	0.00		7999	0.00	63.6	0.00
135MBENCE	0.01	0.01	0.01	63152	498.64	138.1	688.63	0.00	7999	3.82	138.1	5.28
mETOLUE	0.01	0.01	0.01	63152	762.07	101.9	776.55	0.00	7999	5.73	101.9	5.84
124MBENCE	0.01		0.01	63152	464.42	127.8	593.53		7999	0.00	127.8	0.00
DECA	0.03		0.01	63152	900.98	38.4	345.98	0.00	7999	17.20	38.4	6.61
nUNDECA	0.01		0.01	63152	329.74	38.4	126.62		7999	0.00	38.4	0.00
<b>TOTAL</b>	1.00	1.00	1.00		63152.00	<b>ton/año</b>	<b>30465</b>	1.00		7999.00	<b>ton/año</b>	<b>4158</b>
						<b>kton/año</b>	<b>30</b>				<b>kton/año</b>	<b>4</b>

Anexo (continuación)...

COV's	Aplicación de barnices en el sur y norte de la cd							Talleres de pintura de autos				
	BAR SUR	BAR NOR	PE (%)	Emisión total IE (Ind.de madera) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F	PE (%)	Emisión total IE (pintura automotriz) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F
ETAN			0.00	4577	0.00	12.3	0.00		3533	0.00	12.3	0.00
ETILE			0.00	4577	0.00	100	0.00		3533	0.00	100	0.00
ACETIL			0.00	4577	0.00	8.5	0.00		3533	0.00	8.5	0.00
PROPIl			0.00	4577	0.00	112.3	0.00		3533	0.00	112.3	0.00
PROPA		0.00	0.00	4577	0.82	17.6	0.14	0.00	3533	9.07	17.6	1.60
iBUTA	0.00	0.00	0.00	4577	1.73	30.7	0.53	0.00	3533	4.16	30.7	1.28
iBUTE	0.00		0.00	4577	6.34	107.9	6.84	0.05	3533	185.51	107.9	200.17
NBUTA	0.00		0.00	4577	6.09	35.2	2.14	0.01	3533	30.23	35.2	10.64
T2BUTE			0.00	4577	0.00	113.2	0.00		3533	0.00	113.2	0.00
C2BUTE			0.00	4577	0.00	114.6	0.00		3533	0.00	114.6	0.00
PENTA	0.02	0.03	0.02	4577	110.21	39.5	43.53	0.06	3533	204.78	39.5	80.89
1PENTE			0.00	4577	0.00	97.7	0.00		3533	0.00	97.7	0.00
ISOPRE			0.00	4577	0.00	40.5	0.00		3533	0.00	40.5	0.00
T2PENTE	0.00		0.00	4577	0.97	111.7	1.09	0.00	3533	1.13	111.7	1.27
C2PENTE			0.00	4577	0.00	112.1	0.00		3533	0.00	112.1	0.00
M2BUTE	0.00	0.00	0.00	4577	2.33		0.00	0.00	3533	2.27		0.00
MTBE	0.00		0.00	4577	5.12		0.00	0.00	3533	9.45		0.00
22MBUTA	0.00	0.00	0.00	4577	9.59	24.1	2.31	0.00	3533	10.20	24.1	2.46
CPENTA	0.00	0.00	0.00	4577	2.09		0.00	0.00	3533	1.89		0.00
2MPENTA	0.01	0.05	0.03	4577	137.44	42	57.73	0.04	3533	145.84	42	61.25
3MPENTA	0.00	0.06	0.03	4577	142.07	47.9	68.05	0.04	3533	157.55	47.9	75.47
HEXA	0.01	0.06	0.04	4577	160.55	48.2	77.38	0.06	3533	196.84	48.2	94.88
MCPENTA	0.00	0.00	0.00	4577	5.51		0.00	0.00	3533	6.05		0.00
24MPENTA	0.00	0.00	0.00	4577	1.00		0.00	0.00	3533	1.13		0.00
BENCE	0.00	0.04	0.02	4577	85.45	21.8	18.63	0.01	3533	35.52	21.8	7.74
CHEXA		0.00	0.00	4577	0.54		0.00		3533	0.00		0.00
2MHEXA	0.00	0.00	0.00	4577	6.08	41.1	2.50	0.00	3533	2.27	41.1	0.93
23MPENTA	0.00	0.00	0.00	4577	2.88		0.00	0.00	3533	1.13		0.00
3MHEXA	0.00	0.00	0.00	4577	10.38	36.4	3.78	0.00	3533	3.40	36.4	1.24
224MPENTA	0.00	0.00	0.00	4577	5.69		0.00	0.00	3533	6.05		0.00
HEPTA	0.00	0.00	0.00	4577	9.37	49.4	4.63	0.00	3533	1.89	49.4	0.93
MICHEXA	0.00	0.00	0.00	4577	3.15		0.00		3533	0.00		0.00
234MPENTA	0.00		0.00	4577	1.95		0.00	0.00	3533	1.89		0.00
TOLUE	0.83	0.53	0.68	4577	3107.46	63.7	1979.46	0.55	3533	1952.58	63.7	1243.79
2MHEPTA		0.00	0.00	4577	0.54		0.00		3533	0.00		0.00
OCTA	0.00	0.00	0.00	4577	3.12	45.3	1.41	0.00	3533	0.76	45.3	0.34
25MHEXA			0.00	4577	0.00	41.1	0.00		3533	0.00	41.1	0.00
EBENCE	0.02	0.04	0.03	4577	129.02	73	94.18	0.03	3533	91.43	73	66.75
mpXILE	0.07	0.13	0.10	4577	455.18	105.9	482.04	0.09	3533	330.97	105.9	350.50
ESTIRE	0.00	0.00	0.00	4577	3.09		0.00	0.01	3533	23.05		0.00
oXILE	0.02	0.04	0.03	4577	146.02	105.3	153.76	0.03	3533	112.21	105.3	118.16
NONA	0.00	0.00	0.00	4577	5.50	41.4	2.28	0.00	3533	1.13	41.4	0.47
IPBENCE		0.00	0.00	4577	0.54	50	0.27	0.00	3533	1.13	50	0.57
nPBENCE		0.00	0.00	4577	0.82	63.6	0.52		3533	0.00	63.6	0.00
135MBENCE	0.00	0.00	0.00	4577	3.61	138.1	4.98		3533	0.00	138.1	0.00
mETOLUE	0.00	0.00	0.00	4577	4.72	101.9	4.81	0.00	3533	1.51	101.9	1.54
124MBENCE			0.00	4577	0.00	127.8	0.00		3533	0.00	127.8	0.00
DECA			0.00	4577	0.00	38.4	0.00		3533	0.00	38.4	0.00
nUNDECA			0.00	4577	0.00	38.4	0.00		3533	0.00	38.4	0.00
<b>TOTAL</b>	1.00	1.00	1.00		4577.00	<b>ton/año</b>	<b>3013</b>	1.00		3533.00	<b>ton/año</b>	<b>2323</b>
						<b>kton/año</b>	<b>3</b>				<b>kton/año</b>	<b>2</b>

Anexo (continuación)...

COV's	Aplicación de pintura acrílica en construcciones					Aplicación de pintura vinílica en construcciones				
	PE (%)	Emisión total IE (recubrimiento de superficies arquitectónicas) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F	PE (%)	Emisión total IE (recubrimiento de superficies arquitectónicas) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPi (Derwent 1996)	POCP por fuente POCP F
ETAN		23660	0.00	12.3	0.00		23660	0.00	12.3	0.00
ETILE		23660	0.00	100	0.00		23660	0.00	100	0.00
ACETIL		23660	0.00	8.5	0.00		23660	0.00	8.5	0.00
PROPIl		23660	0.00	112.3	0.00		23660	0.00	112.3	0.00
PROPA	0.01	23660	133.91	17.6	23.57	0.00	23660	24.18	17.6	4.26
iBUTA	0.00	23660	96.14	30.7	29.51	0.00	23660	16.12	30.7	4.95
iBUTE	0.07	23660	1596.56	107.9	1722.69	0.10	23660	2439.34	107.9	2632.05
NBUTA	0.03	23660	748.50	35.2	263.47	0.01	23660	169.25	35.2	59.58
T2BUTE		23660	0.00	113.2	0.00		23660	0.00	113.2	0.00
C2BUTE		23660	0.00	114.6	0.00		23660	0.00	114.6	0.00
PENTA	0.04	23660	978.54	39.5	386.52	0.03	23660	722.67	39.5	285.45
1PENTE		23660	0.00	97.7	0.00		23660	0.00	97.7	0.00
ISOPRE		23660	0.00	40.5	0.00		23660	0.00	40.5	0.00
T2PENTE		23660	0.00	111.7	0.00		23660	0.00	111.7	0.00
C2PENTE		23660	0.00	112.1	0.00		23660	0.00	112.1	0.00
2M2BUTE		23660	0.00		0.00	0.00	23660	18.81		0.00
MTBE	0.01	23660	322.75		0.00		23660	0.00		0.00
22MBUTA	0.01	23660	223.18	24.1	53.79	0.00	23660	107.46	24.1	25.90
CPENTA	0.02	23660	587.12		0.00	0.00	23660	8.06		0.00
2MPENTA	0.07	23660	1723.60	42	723.91	0.07	23660	1662.94	42	698.44
3MPENTA	0.04	23660	1006.00	47.9	481.88	0.07	23660	1735.48	47.9	831.29
HEXA	0.04	23660	1047.21	48.2	504.75	0.08	23660	1934.28	48.2	932.32
MCPENTA		23660	0.00		0.00	0.00	23660	51.04		0.00
24MPENTA		23660	0.00		0.00		23660	0.00		0.00
BENCE	0.12	23660	2908.14	21.8	633.98	0.01	23660	255.22	21.8	55.64
CHEXA		23660	0.00		0.00	0.00	23660	8.06		0.00
2MHEXA		23660	0.00	41.1	0.00	0.00	23660	59.10	41.1	24.29
23MPENTA		23660	0.00		0.00	0.00	23660	24.18		0.00
3MHEXA		23660	0.00	36.4	0.00	0.00	23660	110.15	36.4	40.09
224MPENTA	0.01	23660	209.44		0.00	0.00	23660	13.43		0.00
HEPTA		23660	0.00	49.4	0.00	0.00	23660	94.03	49.4	46.45
MHEXA		23660	0.00		0.00	0.00	23660	24.18		0.00
234MPENTA		23660	0.00		0.00		23660	0.00		0.00
TOLUE	0.36	23660	8635.16	63.7	5500.60	0.47	23660	11194.64	63.7	7130.99
2MHEPTA		23660	0.00		0.00	0.00	23660	8.06		0.00
OCTA		23660	0.00	45.3	0.00	0.00	23660	24.18	45.3	10.95
25MHEXA		23660	0.00	41.1	0.00		23660	0.00	41.1	0.00
EBENCE	0.01	23660	284.98	73	208.03	0.02	23660	507.75	73	370.66
mPXILE	0.06	23660	1462.66	105.9	1548.95	0.07	23660	1724.73	105.9	1826.49
ESTIRE	0.03	23660	762.23		0.00	0.00	23660	61.79		0.00
oXILE	0.02	23660	429.18	105.3	451.93	0.02	23660	577.60	105.3	608.21
NONA	0.02	23660	504.72	41.4	208.95	0.00	23660	18.81	41.4	7.79
IPBENCE		23660	0.00	50	0.00		23660	0.00	50	0.00
nPBENCE		23660	0.00	63.6	0.00		23660	0.00	63.6	0.00
135MBENCE		23660	0.00	138.1	0.00	0.00	23660	26.86	138.1	37.10
mETOLUE		23660	0.00	101.9	0.00	0.00	23660	37.61	101.9	38.33
124MBENCE		23660	0.00	127.8	0.00		23660	0.00	127.8	0.00
DECA		23660	0.00	38.4	0.00		23660	0.00	38.4	0.00
nUNDECA		23660	0.00	38.4	0.00		23660	0.00	38.4	0.00
<b>TOTAL</b>	1.00		23660.00	<b>ton/año</b>	<b>12743</b>	1.00		23660.00	<b>ton/año</b>	<b>15671</b>
				<b>kton/año</b>	<b>13</b>				<b>kton/año</b>	<b>16</b>

Anexo (continuación)...

COV's	Impresión en el sur y norte de la Cd.							Cocción de alimentos (no incluido en el IE)			
	OFFS UR	OFFN OR	PE (%)	Emisión total IE (artes gráficas) (ton/año)	Emisión de COV's estimado (ton/año)	POCP individual POCPI (Derwent 1996)	POCP por fuente POCPI <sub>F</sub>	Restau- rantes Perfil de emisión	Tortillerías Perfil de emisión	Rosticerías Perfil de emisión	Comida rápida Perfil de emisión
ETAN			0.00	7999	0.00	12.3	0.00	0.05			
ETILE			0.00	7999	0.00	100	0.00	0.1	0.02	0.06	0.1
ACETIL			0.00	7999	0.00	8.5	0.00	0.06	0.017	0.25	0.06
PROPIL		0.00	0.00	7999	2.61	112.3	2.93				
PROPA	0.00	0.00	0.00	7999	16.69	17.6	2.94	0.26	0.54	0.27	0.32
iBUTA	0.00	0.01	0.01	7999	44.86	30.7	13.77		0.09	0.04	0.06
iBUTE	0.09		0.05	7999	364.87	107.9	393.70				
NBUTA	0.03	0.05	0.04	7999	300.49	35.2	105.77	0.17	0.25	0.12	0.18
T2BUTE	0.00	0.00	0.00	7999	11.48	112.2	12.99				
C2BUTE	0.00	0.00	0.00	7999	12.00	114.6	13.76				
PENTA	0.02	0.12	0.07	7999	579.19	39.5	228.78				
1PENTE	0.00	0.00	0.00	7999	17.74	97.7	17.33				
ISOPRE		0.00	0.00	7999	1.04	40.5	0.42				
T2PENTE	0.00	0.01	0.01	7999	44.34	111.7	49.53				
C2PENTE	0.00	0.00	0.00	7999	24.00	112.1	26.90				
2M2BUTE	0.00	0.01	0.01	7999	46.43		0.00				
MTBE	0.03	0.10	0.07	7999	529.82		0.00				
22MBUTA	0.01	0.01	0.01	7999	71.97	24.1	17.35				
CPENTA	0.00	0.00	0.00	7999	18.29		0.00				
2MPENTA	0.05	0.07	0.06	7999	477.94	42	200.74				
3MPENTA	0.04		0.02	7999	170.41	47.9	81.63				
HEXA	0.05	0.06	0.05	7999	421.13	48.2	202.99				
MCPENTA	0.01	0.02	0.02	7999	128.28		0.00				
24MPENTA	0.01	0.01	0.01	7999	79.80		0.00				
BENCE	0.01	0.02	0.02	7999	128.31	21.8	27.97				
CHEXA	0.00	0.01	0.01	7999	66.73		0.00				
2MHEXA	0.01	0.02	0.02	7999	131.95	41.1	54.23				
23MPENTA	0.01	0.02	0.01	7999	106.91		0.00				
3MHEXA	0.01	0.03	0.02	7999	141.33	36.4	51.44				
224MPENTA	0.04	0.09	0.06	7999	517.37		0.00				
HEPTA	0.01	0.03	0.02	7999	146.53	49.4	72.39				
MCHExA	0.01	0.02	0.01	7999	113.67		0.00				
234MPENTA	0.02	0.04	0.03	7999	219.60		0.00				
TOLUE	0.43	0.13	0.28	7999	2210.06	63.7	1407.81				
2MHEPTA	0.00	0.01	0.01	7999	57.37		0.00				
OCTA	0.00	0.01	0.01	7999	62.59	45.3	28.35				
25MHEXA		0.00	0.00	7999	4.69	41.1	1.93				
EBENCE	0.01	0.01	0.01	7999	86.62	73	63.23				
mpXILE	0.04	0.04	0.04	7999	310.48	105.9	328.80				
ESTIRE	0.00	0.00	0.00	7999	19.85		0.00				
oXILE	0.01	0.02	0.01	7999	113.76	105.3	119.79				
NONA	0.00	0.01	0.00	7999	38.09	41.4	15.77				
IPBENCE	0.00	0.00	0.00	7999	9.40	50	4.70				
nPBENCE	0.00	0.00	0.00	7999	20.88	63.6	13.28				
135MBENCE	0.01	0.00	0.00	7999	36.56	138.1	50.48				
mETOLUE	0.01	0.00	0.01	7999	59.03	101.9	60.15				
124MBENCE		0.00	0.00	7999	18.24	127.8	23.31				
DECA		0.00	0.00	7999	9.90	38.4	3.80				
nUNDECA	0.00	0.00	0.00	7999	5.73	38.4	2.20				
<b>TOTAL</b>	1.00	1.00	1.00		7999.00	ton/año	3701				
						kton/año	4				

## Desarrollo de la ecuación empírica de ajuste

Seleccionar los COV's de mayor asociación con el ozono observado para cada sitio de estudio de acuerdo a los resultados del Análisis de Factores (Tabla 4.4).



Compilar los datos de los COV's seleccionados y del ozono de la Base General de COV's 2002-2006 (Tabla 3.4).



Desarrollar la ecuación para cada sitio estudiado, utilizando el paquete STATISTICA<sup>MR</sup>. La ecuación tiene por variable dependiente la concentración de ozono y por independientes la concentración de los COV's previamente seleccionados. La ecuación lineal tiene la siguiente forma:

$$[O_3] = x[COV_1] + y[COV_2] + z[COV_3] + \dots n[COV_n]$$

The screenshot shows the STATISTICA software interface. A data table is visible with columns for sites (SITIO) and various COVs (ETANO, ETILENO, PROPANO, ISOBUTANO, PROPILENO, n-BUTANO, ACETILENO, T-2-BUTENO, 1-BUTENO). Overlaid on the table are two dialog boxes: 'User-Specified Regression, Custom Loss: MATRIZ DE CORREL...' and 'Estimated function and loss function: MATRIZ...'. The regression dialog shows 'Function: none' and 'Loss: none'. The estimated function dialog shows the equation: 
$$V77=PARAM1/V9+PARAM2/V51+PARAM3/V63$$
 and the loss function: 
$$L = (OBS-PRED)^2$$

## *Desarrollo de la ecuación empírica de ajuste (continuación)...*



Seleccionar la ecuación con el mayor coeficiente de correlación, porcentaje de varianza explicada (Tabla 4.6) y menor residual, calculado como:

$$\text{Residual} = (\text{concentración observada} - \text{concentración estimada})^2$$

Model is: $V77 = \text{param1} * V51 + \text{param2} / v53 + \text{param3} / v55$ (M/ Dep. Var. : OZONO Include condition: V3='MER'			
	Observed	Predicted	Residuals
19/04/03	2.0000	20.0084	-18.0084
19/04/03	2.0000	12.1926	-10.1926
20/04/03	2.0000	24.3292	-22.3292
20/04/03	2.0000	18.8151	-16.8151
20/04/03	3.0000	12.6114	-9.6114
21/04/03	3.0000	43.0683	-40.0683
21/04/03	2.0000	37.0317	-35.0317
21/04/03	3.0000	18.7558	-15.7558
21/04/03	2.6600	18.9495	-16.2895
22/04/03	6.0000	54.6763	-48.6763
22/04/03	3.0000	32.4793	-29.4793
22/04/03	3.0000	17.8970	-14.8970
22/04/03	4.0000	18.7907	-14.7907
23/04/03	2.0000	7.8447	-5.8447



Los resultados de la ecuación para cada sitio se presentan en gráficas de paridad (valores observados vs. valores calculados), como se muestran en la Figura 4.5, Figura 4.6, Figura 4.7 y Figura 4.8; así como el porcentaje de varianza explicado (Tabla 4.6).