

RCN 670017.6210

MANUALES DEL PROGRAMA DE INVENTARIOS DE EMISIONES DE MEXICO

VOLUMEN VIII – DESARROLLO DE MODELOS PARA INVENTARIOS

FINAL

Elaborado para la:

Asociación de Gobernadores del Oeste
Denver, Colorado

Y el

Comité Asesor Binacional

Elaborado por:

Radian International
10389 Old Placerville Road
Sacramento, CA 95827

Febrero 16, 2000

Agradecimientos

Los “*Manuales del Programa de Inventarios de Emisiones de México*” fueron el resultado de los esfuerzos de diversos participantes. El Comité Asesor Binacional (BAC, por sus siglas en inglés), condujo el desarrollo de estos manuales. Los miembros del BAC son:

Dr. John R. Holmes, Consejo de Recursos del Aire del Estado de California

Sr. William B. Kuykendal, Agencia de Protección Ambiental de los EU

Sr. Mike George, Departamento de Calidad Ambiental de Arizona

Dr. Víctor Hugo Páramo, Instituto Nacional de Ecología

Sr. Gerardo Rios, Agencia de Protección Ambiental de los EU

Sr. Carl Snow, Comisión para la Conservación de los Recursos Naturales de Texas

La Asociación de Gobernadores del Oeste (WGA, por sus siglas en inglés), fue la entidad rectora de este proyecto. El Sr. Richard Halvey fungió como Gerente de Proyecto de la WGA. El financiamiento para el desarrollo de este manual fue aportado por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (U. S. EPA, por sus siglas en inglés). Radian International elaboró los manuales bajo la guía de los participantes del BAC y la WGA.

PREFACIO

La contaminación del aire puede tener impactos negativos sobre la salud pública cuando su concentración en la atmósfera alcanza niveles significativos. En la mayor parte de las áreas rurales los problemas de calidad del aire se dejan sentir sólo en raras ocasiones, mientras que muchos ambientes urbanos con frecuencia registran elevadas concentraciones de contaminantes. Durante los últimos años, México ha tenido un gran crecimiento en la urbanización y en la actividad industrial, lo que ha generado serias preocupaciones acerca de la calidad del aire en diversas regiones del país.

La contaminación del aire resulta de una compleja mezcla de, literalmente, miles de fuentes que van desde las chimeneas industriales y los vehículos automotores, hasta el uso individual de productos de aseo, limpiadores domésticos y pinturas; incluso la vida animal y vegetal puede jugar un papel importante en el problema de la contaminación. Debido a la compleja naturaleza de la contaminación del aire, se requieren planes regionales detallados para identificar las fuentes de emisión, así como el desarrollo de métodos para reducir el impacto sobre la salud ocasionado por la exposición a los contaminantes. Entre algunos ejemplos de las actividades para la gestión de la calidad del aire destacan:

- La aplicación de modelos de calidad del aire
- El estudio de las fuentes emisoras de contaminantes para analizar el control de emisiones, cuando así se requiera
- El desarrollo de proyecciones de las emisiones para identificar cambios potenciales en la calidad del aire futura
- El análisis de las tendencias de emisión
- El análisis del transporte de las emisiones de una región a otra.

El desarrollo de inventarios de emisión bien fundamentados es un aspecto clave en cada una de estas funciones de la gestión de la calidad del aire.

El cálculo de estimaciones de emisión que cumplan con las necesidades de la gestión de la calidad del aire requiere un desarrollo y refinamiento continuos; por lo tanto, los esfuerzos para elaborar inventarios “a un tiempo” no son adecuados para dicho proceso de gestión. Con el objetivo de tener un beneficio de larga duración, es necesario instrumentar un *programa de inventarios* que haga posible el desarrollo de estimaciones exactas de las emisiones para todas las regiones geográficas de importancia; que tenga la capacidad de ser refinado con el paso del tiempo, y que pueda aplicarse efectivamente en los procesos de gestión y monitoreo de la calidad del aire. Es por estas razones que se está desarrollando un conjunto de manuales de inventarios de emisiones que puedan ser aplicados en todo el país, para ayudar a coordinar la generación de estimaciones de emisiones consistentes. Estos manuales se han diseñado para ser utilizados por las autoridades locales, estatales y federales, así como por la industria y los consultores privados. El propósito de estos manuales consiste en apoyar el proceso de instrumentación del programa de inventarios y su mantenimiento a lo largo del tiempo, de manera tal que los inventarios de emisiones puedan ser desarrollados periódicamente y mejorados de manera continua.

Los manuales comprenden elementos del programa de inventarios tales como la estimación de emisiones, la planeación del programa, manejo de bases de datos, validación de emisiones y otros temas relevantes. La Figura 1 muestra la serie completa de manuales que serán desarrollados para apoyar la instrumentación completa de un programa de inventarios de largo alcance. A continuación se resume el propósito principal de cada manual.

Volumen I - Planeación del Programa de Inventarios de Emisiones. Este manual presenta los aspectos de planeación que deben ser considerados en un programa de inventario de emisiones al aire. La planeación del programa no se presenta como una actividad “terminal”, sino más bien como un proceso continuo para asegurar tanto el crecimiento en el largo plazo como el éxito del programa de inventarios. *Temas Clave:* propósito del programa; usos finales del inventario; requerimientos de regulación; coordinación de los niveles federal, estatal y local; requerimientos de personal y de manejo de datos; identificación y selección de estudios especiales.

Volumen II - Fundamentos de los Inventarios de Emisiones. Este manual presenta los fundamentos básicos para el desarrollo de inventarios de emisiones, así como los elementos que son aplicables a los diversos tipos de fuentes (e. g., puntuales y de área), para evitar la necesidad de que sean repetidos en varios volúmenes. *Temas Clave:* regulaciones aplicables; efectividad de la regla; penetración de la regla; definiciones sobre contaminantes (exclusión de compuestos volátiles no reactivos); delimitación de las fuentes puntuales y de área; reconciliación de las fuentes puntuales y de área.

Volumen III - Técnicas Básicas de Estimación de Emisiones. Este manual presenta las metodologías básicas utilizadas para hacer estimaciones de emisiones, incluyendo ejemplos y cálculos. Por otro lado las herramientas para la elaboración de inventarios asociadas con cada metodología se identifican e incluyen en el Volumen XI (Referencias). *Temas Clave:* muestreo en la fuente, modelos de emisiones, encuestas, factores de emisión, balance de materiales y extrapolación.

Volumen IV - Fuentes Puntuales. Este manual contiene las guías para elaborar inventarios de emisiones de fuentes puntuales. Incluye una tabla de referencias cruzadas para cada combinación de industria y tipo de dispositivo (e. g., refinación de petróleo y dispositivos de combustión), con una o más de las metodologías básicas presentadas en el Volumen III. *Temas Clave:* tabla de referencias cruzadas; parámetros de chimenea; dispositivos de control; consideraciones de diseño y de proceso; diferencias geográficas y variabilidad en México; aseguramiento y control de calidad (AC/CC); procesos omitidos; referencias de datos y formatos para recopilación de datos.

Volumen V - Fuentes de Área (incluyendo fuentes móviles que no circulan por carreteras). Este manual contiene los lineamientos para el desarrollo de inventarios de emisiones de fuentes de área. Además de presentar información general sobre las fuentes de área, contiene una tabla de referencias cruzadas entre cada categoría de fuente de área (e. g., aplicación de asfalto) con una o más de las metodologías básicas incluidas en el Volumen III. Posteriormente, se discute la información específica para cada categoría de fuente definida en la

tabla. *Temas Clave*: clasificación y definición de fuentes de área; tabla de referencias cruzadas; factores de control; diferencias geográficas y variabilidad en México; AC/CC; referencias de datos y formatos para recopilación de datos (cuestionarios).

Volumen VI - Vehículos Automotores. Debido a que los vehículos automotores son intrínsecamente diferentes a las fuentes puntuales y a las de área, tanto los métodos de estimación disponibles como los datos requeridos son también diferentes. Los modelos son las herramientas preferidas para estimar las emisiones de estas complejas fuentes. Muchos de estos modelos utilizan datos de pruebas exhaustivas aplicables a un país o a una región determinados. Este manual se enfoca principalmente en la fase de desarrollo de datos para la estimación de emisiones de vehículos automotores. *Temas Clave*: métodos de estimación disponibles; datos e información primarios, secundarios y terciarios; clasificación de fuentes; fuentes de factores de emisión; variabilidad geográfica dentro de México y AC/CC.

Volumen VII - Fuentes Naturales. Este manual proporciona los lineamientos para el desarrollo de inventarios de emisiones de fuentes naturales (e. g., compuestos orgánicos volátiles [COVs] biogénicos y óxidos de nitrógeno [NO_x]) en suelos. Además, incluye los aspectos teóricos de los cálculos de emisiones y la discusión de modelos específicos. *Temas Clave*: clasificación y definición de fuentes; mecanismos de emisión; algoritmos básicos de emisión; determinación de biomasa; desarrollo de datos de uso y cobertura del suelo; ajustes temporales y meteorológicos, y enfoques para el cálculo de emisiones.

Volumen VIII - Desarrollo de Modelos para Inventarios. Este manual proporciona los lineamientos para el desarrollo de datos de inventarios que serán utilizados en modelos de calidad del aire, y trata aspectos tales como la distribución temporal y espacial, la especiación y proyección de estimaciones de emisiones. *Temas Clave*: definición de términos utilizados en modelado; ajuste estacional; distribución temporal y espacial; especiación química y proyecciones (factores de crecimiento y control).

Volumen IX - Evaluación del Programa de Inventarios de Emisiones. Este manual consta de tres partes: AC y CC, análisis de incertidumbre y verificación de emisiones. La parte de AC y CC define el programa global de aseguramiento y control de calidad, y ha sido escrito para complementar los procedimientos de AC y CC para las fuentes específicas que se presentan en otros manuales. El análisis de incertidumbre no sólo incluye los métodos para evaluar la incertidumbre en las estimaciones de emisiones, sino también para evaluarla en los valores de modelado tales como los perfiles de especiación y los factores de proyección de emisiones. La sección de verificación de emisiones describe varios análisis para evaluar la exactitud de las estimaciones. Los ejemplos incluyen modelos de receptor y análisis de trayectoria, combinados con técnicas específicas para el análisis de datos. *Temas Clave:* descripción de conceptos y definición de términos; protocolo de revisión de inventarios; evaluación de integridad, exactitud y consistencia; metodologías recomendadas para el manejo de la incertidumbre, y metodologías aplicables para la verificación de emisiones.

Volumen X - Manejo de Datos. Este manual trata de las necesidades asociadas con los aspectos del manejo de datos del programa nacional de inventarios de emisiones de México. *Temas Clave:* sistemas y herramientas generales para el manejo de datos; sistemas y herramientas de software específicos; sistemas de programación; confidencialidad; presentación electrónica; frecuencia de actualizaciones, mantenimiento de registros; bases de datos específicas de México y elaboración de informes.

Volumen XI - Referencias. Este manual es un compendio de las herramientas que pueden utilizarse en el desarrollo de un programa de inventarios de emisiones. Se incluyen las herramientas citadas en los otros manuales para hacer inventarios (e. g., documentos impresos y electrónicos, así como modelos de computadora).

670017.6210
Febrero 16, 2000

Richard Halvey
Gerente de Proyecto
Asociación de Gobernadores del Oeste
600 17th Street
Suite 1705, South Tower
Denver, CO 80202

Asunto: Entrega de la versión final del *Manual de Desarrollo de Modelos para Inventarios* del Proyecto de Metodología para Inventarios de Emisiones de México

Estimado Rich:

Anexa se encuentra una copia de la versión final del manual Volumen VIII (*Desarrollo de Modelos para Inventario*) para el proyecto Metodología para Inventarios de Emisiones de México. Este es el sexto documento final que hemos desarrollado de nuestra serie de manuales para inventarios de emisiones. Adicionalmente, hemos entregado al INE un “máster” impreso por un lado y los archivos electrónicos que contienen tanto el texto como las figuras para facilitar la reproducción y los esfuerzos de traducción. Los archivos electrónicos “enlazados” estarán listos en el futuro proximo. Nuestros colegas en Dames & Moore en la Ciudad de México iniciarán la traducción al español en las próximas semanas.

Si hubiera cualquier pregunta relacionada con este manual, por favor, comuníquese conmigo al teléfono (916) 857-7408 o con Marty Wolf al (916) 857-7468.

Atentamente

Paula G. Fields
Project Manager

Anexo

C: Víctor Hugo Páramo, INE (cinco copias con archivo electrónico)
Rafael Ramos, Dames & Moore de México (una copia con archivo electrónico)
Comité Asesor Binacional
Archivo del Proyecto

Distribución del Reporte de Mexicali:

Radian	Paula Marty Archivo (original)
INE	VH Páramo Jorge Sarmiento
BAC	John Leary Carl Snow, TNRCC Gary Neuroth, ADEQ John Holmes, CARB Bill Kuykendal, EPA GerardoRios, EPA Región IX Jim Yarbrough, EPA Región VI

CONTENIDO

Sección	Pág.
PREFACIO	i
1.0 INTRODUCCION	1-1
2.0 REQUERIMIENTOS PARA EL MODELADO DE INVENTARIOS	2-1
3.0 DISTRIBUCION TEMPORAL	3-1
3.1 Perfiles de Distribución Estacional.....	3-3
3.2 Perfiles de Distribución Semanal.....	3-5
3.3 Perfiles de Distribución por Hora.....	3-6
3.4 Emisiones Específicas por Día.....	3-8
3.5 Consideraciones del Tipo de Fuente	3-9
3.6 Ejemplo de Distribución Temporal.....	3-10
4.0 DISTRIBUCION ESPACIAL	4-1
4.1 Puntuales (Fuentes Puntuales).....	4-6
4.2 Areas (Fuentes de Area y Naturales).....	4-8
4.3 Líneas (Vehículos Automotores, Ferrocarriles y Rutas Oceánicas)	4-10
4.4 Ejemplo de Distribución Espacial.....	4-11
5.0 ESPECIACION.....	5-1
5.1 Perfiles de Especiación para GOTs y PM.....	5-2
5.2 Grupos de Reactividad Fotoquímica.....	5-6
5.3 Especiación de NO _x	5-8
5.4 Distribución del Tamaño de PM	5-8
5.5 Otros Contaminantes	5-9
5.6 Consideraciones sobre el Tipo de Fuente	5-9
5.7 Ejemplo de Especiación	5-10
6.0 PROYECCIONES	6-1
6.1 Factores de Crecimiento.....	6-1
6.2 Factores de Control.....	6-5
6.3 Consideraciones del Tipo de Fuente	6-7
6.4 Ejemplo de Proyección	6-8

7.0	EJEMPLO DE DESARROLLO DE UN MODELADO DE INVENTARIOS	7-1
7.1	Distribución Temporal	7-1
7.2	Distribución Espacial.....	7-7
7.3	Especiación.....	7-10
7.4	Proyecciones	7-10
8.0	RESUMEN DEL MODELADO DE INVENTARIOS HIPOTETICO	8-1
9.0	CONCLUSION.....	9-1
10.0	REFERENCIAS.....	10-1

APENDICE A: Hojas de Cálculo para el Modelado de un Inventario Hipotético

APENDICE B: Perfiles de Especiación de GOTs para el Modelado de un Inventario Hipotético

APENDICE C: Perfiles de Especiación de PM para el Modelado de un Inventario Hipotético.

FIGURAS Y TABLAS

Figuras	Pág.
1	Manuales del Programa de Inventarios de Emisiones de México.....iii
1-1	Comunidad Hipotética para el Modelado de Inventarios 1-5
2-1	Estructura del GEMAP..... 2-6
2-2	Diagrama Conceptual del Modelado de Inventarios de Contaminantes Peligrosos del Aire de Ambos Nogales 2-7
3-1	Ejemplos de los Perfiles de Distribución Estacional Constantes y Variables Supuestos para el Modelado de Inventarios Hipotético..... 3-4
3-2	Ejemplo de los Perfiles de Distribución por Hora Supuestos para el Modelado de Inventarios Hipotético..... 3-7
3-3	Perfiles de Distribución Temporal Mensuales Supuestos para el Modelado de Inventarios Hipotético..... 3-11
3-4	Perfiles de Distribución Temporal Semanales Supuestos para el Modelado de Inventarios Hipotético..... 3-12
3-5	Perfiles de Distribución Temporal por Hora Supuestos para el Modelado de Inventarios Hipotético..... 3-13
4-1	Comunidad Hipotética para el Modelado de Inventarios y Cuadrante de Modelado 4-2
4-2	Distribución Vertical para las Fuentes Puntuales y Vehículos Automotores 4-5
4-3	Comparación de las Coordenadas UTM y de Latitud y Longitud en Lázaro Cárdenas, Estado de Michoacán, México 4-7
4-4	Sustitutos Espaciales para el Modelado de Inventarios Hipotético..... 4-12
5-1	Descripción de las Definiciones de Hidrocarburos..... 5-4
5-2	Especiación CB-IV para la Fuente Puntual del Modelado de Inventarios Hipotético..... 5-13
6-1	Proyecciones Estimadas de la Categoría de Producto de Consumo para el Modelado de Inventarios Hipotético..... 6-11

8-1	Distribución por Hora de las Emisiones de GOTs en un Día de la Semana de Verano para el Modelado de Inventarios Hipotético	8-2
8-2	Comparación de las Emisiones de GOT por Hora en Verano e Invierno para el Modelado de Inventarios Hipotético.....	8-5
8-3	Distribución Espacial de las Emisiones de GOT para un Día de la Semana en Verano para el Modelado de Inventarios Hipotético	8-6

Tablas**Pág.**

1-1	Emisiones Anuales Supuestas para las Fuentes de Emisión en la Comunidad Hipotética para el Modelado de Inventarios	1-6
2-1	Datos Típicos Año Base de un Inventario– Fuentes Puntuales.....	2-1
2-2	Datos Típicos Año Base de un Inventario– Fuentes de Area.....	2-2
2-3	Datos Típicos Año Base de un Inventario– Fuentes de Vehículos Automotores	2-2
2-4	Datos Típicos Año Base de un Inventario– Fuentes Biogénicas	2-3
2-5	Ejemplo de un Sistema de Codificación de Asignación de Perfiles Temporales, Sustitutos Espaciales y Perfiles de Especiación	2-4
3-1	Perfil de Distribución Temporal Mensual Supuesto de Vehículos Automotores para el Modelado de Inventarios Hipotético	3-14
3-2	Perfil de Distribución Temporal Semanal Supuesto de los Vehículos Automotores para el Modelado de Inventarios Hipotético	3-16
3-3	Perfil de Distribución Temporal por Hora Supuesto de los Vehículos Automotores para el Modelado de Inventarios Hipotético	3-18
4-1	Población de un Dominio de Inventario Hipotético de Cuatro Celdas	4-9
4-2	Sustitutos Espaciales Calculados de Consumo de Solventes para un Dominio de Inventario Hipotético de Cuatro Celdas.....	4-9
5-1	Especies Orgánicas del Enlace de Carbono IV	5-7
5-2	Especies Orgánicas SAPRC	5-7

5-3	Estimados de Emisiones de Especies de Modelo Agrupado CB-IV para la Caldera del Modelado de Inventarios Hipotético	5-12
7-1	Perfil de Distribución Temporal Supuesto de la Gasolinería para el Modelado de Inventarios Hipotético.....	7-2
7-2	Perfil de Distribución Semanal Supuesto de la Gasolinería para el Modelado de Inventarios Hipotético.....	7-3
7-3	Emisiones Estimadas Distribuidas Semanalmente de la Gasolinería para el Modelado de Inventarios Hipotético.....	7-4
7-4	Perfil de Distribución Temporal por Hora Supuesto de la Gasolinería para el Modelado de Inventarios Hipotético.....	7-5
7-5	Emisiones Estimadas Distribuidas Temporalmente para el Modelado de Inventarios Hipotético.....	7-6
7-6	Emisiones Estimadas Distribuidas Espacialmente de la Gasolinería (Celda A1) para el Modelado de Inventarios Hipotético	7-8
7-7	Emisiones Estimadas Distribuidas Espacialmente de la Gasolinería (Celda A3) para el Modelado de Inventarios Hipotético	7-9
8-1	Emisiones de GOT para la Hora 12 de un Día de la Semana de Verano para el Modelado de Inventarios Hipotético.....	8-1

ACRONIMOS

µg	microgramo
AC	aseguramiento de calidad
AMS	Area and Mobile Source (<i>Fuente de Area y Móvil</i>)
ARB	California Air Resources Board (<i>Consejo de Recursos del Aire de California</i>)
BAC	Binational Advisory Committee (<i>Comité Asesor Binacional</i>)
CAS	Chemical Abstract System
CB-IV	Enlace carbono IV
CC	control de calidad
CC	Emisiones del cárter
CEIDARS	California Emission Inventory Development and Reporting System (<i>Sistema de Desarrollo y Reporte de Inventarios de Emisiones de California</i>)
CFC	clorofluorocarbono
CMAF	Clasificación Mexicana de Actividades y Productos
co	carbono orgánico
CO	monóxido de carbono
COV	compuestos orgánicos volátiles
CST	emisiones de arranque en frío
DNL	emisiones diurnas
EC	carbón elemental
EC	eficiencia de control
EMS-95	Emissions Modeling System – 95 (<i>Sistema de Modelado de Emisiones – 95</i>)
EU	Estados Unidos
FIRE	Factor Information Retrieval Data System (<i>Sistema de Recuperación de Datos de Información de Factores</i>)
g	gramo
GCVTC	Grand Canyon Visibility and Transport Commission (<i>Comisión de Transporte y Visibilidad del Gran Cañón</i>)

GEMAP	Geocoded Emissions Modeling and Projections System (<i>Sistema Geocodificado para el Modelado y Proyección de Emisiones</i>)
GOR	gas orgánico reactivo
GOT	gas orgánico total
GPS	Global Positioning Systems (<i>Sistema de Posicionamiento Global</i>)
H ₂ SO ₄	ácido sulfúrico
HAP	Hazardous Air Pollutant (<i>Contaminante Peligroso del Aire</i>)
HC	hidrocarburo
HCFC	hidroclorofluorocarbono
HCT	hidrocarburos totales
HFC	hidrofluorocarbono
hr	hora
HSK	emisiones húmedas calientes
HST	emisiones de arranque en caliente
I/M	inspección y mantenimiento
ID	número de identificación
IFU	Fraunhofer-Institut für Atmosphärische Umweltforschung (Instituto Fraunhofer para la Investigación Ambiental Atmosférica)
INE	Instituto Nacional de Ecología
km	kilómetro
m	metro
m ²	metro cuadrado
MCCM	modelo de calidad del aire a escala regional del IFU
Mg	megagramo (10 ⁶ gramos; 1 tonelada métrica)
MOBILE	Modelo de factor de emisiones de vehículos automotores de la U. S. EPA
N/A	no aplicable
NAICS	North American Industry Classification System (<i>Sistema de Clasificación Industrial de América del Norte</i>)
NH ₃	amoníaco

NMHC	hidrocarburos no metánicos
NMOG	gases orgánicos no metánicos
NO	óxido nitroso
NO ₂	bióxido de nitrógeno
NO _x	óxidos de nitrógeno
O ₃	ozono
OH [•]	radical oxhidrilo
PCBEIS	modelo de emisiones biogénicas de la U.S. EPA
PFC	perfluorocarbono
PM	material particulado
PM ₁₀	Partículas de diámetro equivalente inferior o igual a 10 micras
PM _{2.5}	Partículas de diámetro equivalente inferior o igual a 1.5 micras
PR	penetración de la regla
PST	partículas suspendidas totales
RACM	Regional Atmospheric Chemistry Mechanism (<i>Mecanismo Regional de Química Atmosférica</i>)
RADM2	Regional Atmospheric Deposition Model Mechanism, Version 2 (<i>Mecanismo Regional del Modelo de Deposición Atmosférica, Versión 2</i>)
RE	efectividad de la regla
REV	Running Evaporative Emissions (<i>emisiones evaporativas en operación</i>)
REX	Running Exhaust emissions (<i>emisiones de escape en operación</i>)
SAPRC	California Statewide Air Pollution Research Center (<i>Centro de Investigación de la Contaminación del Aire a Nivel Estatal de California</i>)
SCC	Source Classification Code (<i>Código de Clasificación de Fuentes</i>)
SIC	Standard Industrial Classification (<i>Clasificación Industrial Estándar</i>)
SIG	Sistema de Información Geográfica
SNIFF	Sistema Nacional de Información de Fuentes Fijas
SO ₂	bióxido de azufre
SO ₃	trióxido de azufre
SO ₄ ²⁻	ión sulfato

SO _x	óxidos de azufre
SPECIATE	Base de datos del perfil de especiación de la U.S. EPA
TDM	Travel Demand Models (<i>modelos de demanda de recorrido</i>)
TNRCC	Texas Natural Resource Conservation Commission (<i>Comisión para la Conservación de los Recursos Naturales de Texas</i>)
U.S. EPA	United States Environmental Protection Agency (<i>Agencia de Protección Ambiental de EU</i>)
UAM	Urban Airshed Model (<i>Modelo de Cuenca Atmosférica Urbana</i>)
UTM	Mercator Transverso Universal
VKT	Vehicle's Kilometers Traveled (<i>kilómetros recorridos por vehículo</i>)
WGA	Western Governors' Association (<i>Asociación de Gobernadores del Oeste</i>).

Perfil de Especiación de GOTs (Puntual – Caldera)

Perfil de Especiación Puntual - Caldera				
Perfil	0002			
Descripción: Calderas de combustión Externa, Calentadores de Espacio, Industriales, Aceite Destilado				
Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
1	43105	ISOMEROS DE HEXANO	86.17	5.20
2	43106	ISOMEROS DE HEPTANO	100.2	2.60
3	43107	ISOMEROS DE OCTANO	114.23	4.70
18	43122	ISOMEROS DE PENTANO	72.15	5.50
56	74986	PROPANO	44.09	1.20
62	106978	N-BUTANO	58.12	12.20
64	75285	ISOBUTANO	58.12	4.10
69	109660	N-PENTANO	72.15	4.70
80	110543	HEXANO	86.17	10.80
81	142825	HEPTANO	100.2	0.30
231	50000	FORMALDEHIDO	30.03	48.70

Perfil de Especiación de GOTs (Puntual – Proceso)

Perfil de Especiación Puntual – Proceso				
Perfil	1003			
Descripción: Evaporación de Solventes Orgánicos – Operaciones de Recubrimiento de Superficies – Solventes – Pintura Base - General				
Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
4		ISOMEROS DE NONANO	128.25	2.79
81	142-82-5	HEPTANO	100.2	2.94
90	108-08-7	2,4-DIMETILPENTANO	100.2	1.7
91	110-82-7	CICLOHEXANO	84.16	0.52
101	108-87-2	METILCICLOHEXANO	98.21	3.61
113		2-4-DIMETILHEXANO	114.22	7.2
124	1678-91-7	ETILCICLOHEXANO	112.23	1.43
142	111-76-2	BUTILCELOSOLVE	118.17	6.48
194	141-78-6	ETILACETATO	88.1	2.04
196	138-22-7	N-BUTIL ACETATO	116.16	9.5
212		C5-ESTER	130.19	1.26
242	67-64-1	ACETONA	58.8	1.27
243	78-93-3	METIL ETIL CETONA	72.1	0.54
245	180-10-1	METIL ISOBUTIL CETONA	100.16	0.36
247	110-43-0	METIL AMIL CETONA	114.21	0.83
248	12/6/7379	2-METIL-3-HEXANONA	114.19	3.75
307	1330-20-7	ISOMEROS DE XILENO	106.16	3.7
308		ISOMEROS DE ETILTOLUENO	120.19	0.2
311	25551-13-7	TRIMETILBENCENO	120.19	0.11
319	108-88-3	TOLUENO	92.13	37.87
320	100-41-4	ETILBENCENO	106.16	0.54
321	95-47-6	O-XILENO	106.16	4.47
626	1640-89-7	ETILCICLOPENTANO	98.19	0.22
627	15890-40-1	TRIMETILCICLOPENTANO	112.16	0.17
628		DIMETILCICLOHEXANO	112.16	4.01

Perfil de Especiación de GOTs (Vehículos Automotores)

Perfil de Especiación Puntual – Vehículos Automotores que Circulan por Carretera				
Perfil	1101			
Descripción: Vehículos Ligeros a Gasolina – Caminos Suburbano				
Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
31		C10 PARAFINAS	142.28	0.16
32		C9 PARAFINAS	128.15	0.00
53	74828	METANO	16.04	10.07
54	74840	ETANO	30.07	1.41
55	74851	ETILENO	28.05	3.92
56	74986	PROPANO	44.09	0.56
57	115071	PROPENO	42.08	1.06
58	74861	ACETILENO	26.04	8.75
59	463490	PROPADIENO	40.06	0.08
60	74997	METILACETILENO (PROPINO)	40.06	0.06
61	760203	3-METIL-1-PENTENO	84.16	0.00
62	106978	N-BUTANO	58.12	9.48
63	106989	BUTANO	56.10	8.85
64	75285	ISO-BUTANO	58.12	1.70
65	115117	ISOBUTILENO	56.10	0.00
66	624646	T-2-BUTENO	56.11	0.55
67	590181	CIS-2-BUTENO	56.11	0.50
68	106990	1,3-BUTADIENO	54.09	1.68
69	109660	N-PENTANO	72.15	2.88
70	78784	ISO PENTANO	72.15	6.54
72	563451	3-METIL-1-BUTENO	70.13	0.15
73	109671	1-PENTENO	70.13	0.32
75	646048	TRANS-2-PENTENO	70.13	0.68
76	627203	CIS-2-PENTENO	70.13	0.38
77	513359	2-METIL-2-BUTENO	70.13	0.98
78	107835	2-METILPENTANO	86.17	1.76
79	96140	3-METILPENTANO	86.17	1.09
80	110543	HEXANO	86.17	0.87
81	142825	HEPTANO	100.20	0.65
82	111659	OCTANO	114.23	0.31
83	563780	2,3-DIMETIL-1-BUTENO	84.16	0.00
84	118042	NONANO	128.25	0.19
85	124185	N-DECANO	142.28	0.16
86	120214	N-UNDECANO	156.31	0.53
87	287923	CICLOPENTANO	70.14	0.35
88	78795	ISOPRENO	68.12	0.07
89	592416	1-HEXENO	84.16	0.31
90	108087	2,4-DIMETILPENTANO	100.20	0.58
91	110827	CICLOHEXANO	84.16	1.40
92	540841	2,2,4-TRIMETILPENTANO	114.22	1.97
93	565753	2,3,4-TRIMETILPENTANO	114.22	0.12
101	108872	METILCICLOHEXANO	98.21	0.50
102	96377	METILCICLOPENTANO	84.16	0.78

Perfil de Especiación de GOTs (Vehículos Automotores) (Continuación)

Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
103	591764	2-METIL HEXANO	100.20	0.00
107	922612	3-METIL-T-2-PENTENO	84.16	0.00
109	693890	METILCICLOPENTENO	82.14	0.01
110	110838	CICLOHEXENO	82.14	0.00
111	565593	2,3-DIMETIL PENTANO	100.20	1.40
112	79298	2,3-DIMETIL BUTANO	86.17	0.69
113		2,4-DIMETILHEXANO	114.22	0.63
114	592132	2,5-DIMETILHEXANO	114.22	0.00
115	760214	2-ETIL-1-BUTENO	84.16	0.00
116		2,3,3-TRIMETILPENTANO	14.22	1.09
117	107006	1-BUTINO	54.09	0.00
118	503173	2-BUTINO	54.09	0.00
119		C-3-HEXENO	84.16	0.00
120	625274	2-METIL-2-PENTENO	84.16	0.42
121		2-HEXENO	84.16	0.16
122		DIMETILETILHEXENO	112.20	0.12
123	590738	2,2-DIMETILHEXANO	114.22	0.05
126		2,3-DIMETILHEXANO	114.22	0.00
127	75832	2,2-DIMETILBUTANO	86.17	0.21
128	142290	CICLOPENTENO	68.11	0.37
131	589344	3-METIL HEXANO	100.20	1.06
132	592278	2-METIL HEPTANO	114.23	0.19
133	589537	4-METIL HEPTANO	114.23	0.45
134		3-METIL HEPTANO	114.23	0.36
135		1-METILCICLOHEXENO	96.17	0.00
231	50000	FORMALDEHIDO	30.03	0.74
232	75070	ACETALDEHIDO	44.05	0.78
233	123386	PROPIONALDEHIDO	58.08	0.02
234	107028	ACROLEINA	56.07	0.06
240	123739	CROTONALDEHIDO	70.09	0.02
314		C10 AROMATICO	134.22	2.02
318	71432	BENCENO	78.11	1.39
319	108883	TOLUENO	92.13	5.15
320	100414	ETIL BENCENO	106.16	0.77
321	95476	O-XILENO	106.16	1.56
322	108383	M-XILENO	106.16	0.00
323	106423	P-XILENO	106.16	2.56
324	108678	1,3,5-TRIMETILBENCENO	120.19	1.87
325	95636	1,2,4-TRIMETILBENCENO	120.19	2.30
326	103651	N-PROPILBENCENO	120.19	0.48
332	135988	S-BUTILBENCENO	134.21	0.11
333	135013	1,2-DIETILBENCENO	134.21	0.59
334	141935	M-DIETILBENCENO	134.21	0.59
337	526738	1,2,3-TRIMETILBENCENO	120.19	0.66
381	100527	BENZALDEHIDO	106.13	0.08
476		2,3,5-TRIMETILHEXANO	128.25	0.09
477		2,4-DIMETILHEPTANO	128.26	0.11
478		3,5- DIMETILHEPTANO	128.26	0.00
479		2,5- DIMETILHEPTANO	128.26	0.73

**Perfil de Especiación de GOTs (Vehículos Automotores)
(Continuación)**

Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
480		2,3-DIMETILHEPTANO	128.26	0.00
481	691372	4-METIL-1-PENTENO	84.16	0.00
482		2-METILOCTANO	128.26	0.01
483		2,4,5-TRIMETILHEPTANO	142.29	0.26
514	13269528	T-3-HEXENO	84.16	0.29
618		2,2,5-TRIMETILHEXANO	128.26	0.46
623	496117	INDANO	119.18	0.52
682		2,4-DIMETILOCTANO	142.29	0.07
683		3,4-DIMETILOCTANO	142.29	0.74
684		1-METIL-3-ETILBENCENO	120.19	1.06
685		1-METIL-2-ETILBENCENO	120.19	0.21
686	538932	ISOBUTILBENCENO	134.22	0.55
687		1-METIL-3N-PROPILBENCENO	134.22	0.17
688		1-METIL-3-ISOPROPILBENCENO	134.22	0.38
689		2-METILDECANO	156.32	1.08
691		NO IDENTIFICADO	86.00	8.46

Perfil de Especiación de GOTs (Gasolinerías)

Perfil de Especiación Puntual – Gasolinerías				
Perfil	11190			
Descripción: Comercialización de Gasolina				
Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
1		ISOMEROS DE HEXANO	86.17	0.10
5		ISOMEROS DE DECANO	142.28	0.10
6		ISOMEROS DE UNDECANO	156.30	0.00
6		ISOMEROS DE UNDECANO	156.30	0.09
7		ISOMEROS DE DODECANO	170.32	0.05
7		ISOMEROS DE DODECANO	170.32	0.00
9		ISOMEROS DE TETRADECANO	190.38	0.02
11		C-7 CICLOPARAFINAS	98.19	0.05
20		C9 OLEFINAS	126.24	0.01
20		C9 OLEFINAS	126.24	0.00
20		C9 OLEFINAS	126.24	0.08
20		C9 OLEFINAS	126.24	0.01
21		C10 OLEFINAS	140.27	0.00
21		C10 OLEFINAS	140.27	0.04
31		C10 PARAFINAS	142.28	0.00
31		C10 PARAFINAS	142.28	0.00
31		C10 PARAFINAS	142.28	0.00
32		C9 PARAFINAS	128.25	0.48
34		C-8 OLEFINAS	112.23	0.21
34		C-8 OLEFINAS	112.23	0.00
37		C8 PARAFINAS	114.23	3.84
38		C7 PARAFINAS	100.20	0.04
39		C5 OLEFINA	70.13	1.91
40		C5 PARAFINA	72.15	2.09
41		C5 PARAFINA/OLEFINA	70.13	1.08
42		C11 OLEFINAS	154.29	0.00
42		C11 OLEFINAS	154.29	0.04
42		C11 OLEFINAS	154.29	0.01
44		ISOMEROS DE C9H16	124.23	0.00
44		ISOMEROS DE C9H16	124.23	0.02
44		ISOMEROS DE C9H16	124.23	0.00
45		C8H14	110.20	0.00
63	106989	BUTENO	56.10	0.14
64	75285	ISOBUTANO	58.12	2.65
65	115117	ISOBUTILENO	56.10	0.14
80	110543	HEXANO	86.17	3.91
81	142825	HEPTANO	100.20	1.84
87	287923	CICLOPENTANO	70.14	0.16
101	108872	METILCICLOHEXANO	98.21	0.21
102	96377	METILCICLOPENTANO	84.16	0.68
104		HEPTENI	98.18	0.03
109	693890	METILCICLOPENTENO	82.14	0.54
110	110832	CICLOHEXENO	82.14	0.04

Perfil de Especiación de GOTs (Gasolinerías) (Continuación)

Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
124	1678917	ETILCICLOHEXANO	112.23	0.08
128	142290	CICLOPENTENO	68.11	0.18
181		C7H12O	112.17	0.04
249		DIMETILCICLOBUTANONA	98.14	0.05
309		ISOMEROS DE BUTILBENCENO	134.22	3.18
309		ISOMEROS DE BUTILBENCENO	134.22	0.03
310		ISOMEROS DE DIETILBENCENO	134.22	0.02
311	25551137	TRIMETILBENCENO	120.19	4.29
312		ISOMEROS DE PROPILBENCENO	120.19	0.76
315		C10H12	132.22	0.04
316		ISOMEROS DE C10H10	130.19	0.00
316		ISOMEROS DE C10H10	130.19	0.00
318	71432	BENCENO	78.11	3.25
319	108883	TOLUENO	92.13	15.22
320	100414	ETILBENCENO	106.16	4.07
321	95476	O-XILENO	106.16	6.41
326	103651	N-PROPILBENCENO	120.19	0.92
327	98828	CUMENO (ISOPROPILBENCENO)	120.20	0.33
335	100425	ESTIRENO	104.14	0.17
336	25013154	METIL ESTIRENO	118.19	0.05
349		ETILTOLUENI	120.19	3.61
352		ETILDIMETILBENCENO	134.22	2.24
353		ETILDIMETILBENCENO	134.22	1.03
354		C5-ALCALIBENCENOS	148.24	0.35
354		C5-ALCALIBENCENOS	148.24	0.04
354		C5-ALCALIBENCENOS	148.24	0.83
354		C5-ALCALIBENCENOS	148.24	0.09
354		C5-ALCALIBENCENOS	148.24	0.02
354		C5-ALCALIBENCENOS	148.24	0.05
354		C5-ALCALIBENCENOS	148.24	0.05
355		C5-ALCALIBENCENOS (INSAT)	146.25	0.05
356		C6-ALCALIBENCENO	162.27	0.00
356		C6-ALCALIBENCENO	162.27	0.00
356		C6-ALCALIBENCENO	162.27	0.02
356		C6-ALCALIBENCENO	162.27	0.06
356		C6-ALCALIBENCENO	162.27	0.00
356		C6-ALCALIBENCENO	162.27	0.03
357		C4-ALCALIESTIRENOS	160.26	0.04
357		C4-ALCALIESTIRENOS	160.26	0.00
357		C4-ALCALIESTIRENOS	160.26	0.01
357		C4-ALCALIESTIRENOS	160.26	0.02
358		C7-ALCALIBENCENO	176.30	0.00
381	100527	BENZALDEHIDO	106.13	0.00
400	108907	CLOROBENCENO	112.56	0.03
413		DIMETILNAFTIRIDINA	158.20	0.01
420	91203	NAFTALENO	128.17	0.80
421		METIL NAFTALENOS	152.20	0.64
465		C2-ALQUILNAFTALENO	156.23	0.10
466		METILINDANOS	132.21	0.52

Perfil de Especiación de GOTs (Gasolinerías) (Continuación)

Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
466		METILINDANOS	132.21	0.01
466		METILINDANOS	132.21	0.00
468		METILDIHIDRONAFTALENO	144.22	0.01
469		DIMETILINDANOS	146.23	0.42
469		DIMETILINDANOS	146.23	0.00
469		DIMETILINDANOS	146.23	0.00
470		DIHIDRONAFTALENO	130.19	0.06
471		DIMETILINDENO	142.22	0.01
473		ETILINDANO	146.23	0.04
474		TRIMETILINDANO	160.26	0.06
484		M-XILENO Y P-XILENO	106.16	15.28
495		METILBUTENO	70.13	0.06
496		METILBUTADIENO	68.12	0.01
497		METILPENTENOS	84.16	0.41
497		METILPENTENOS	84.16	0.48
498		METILPENTANO	86.17	1.76
499		METILCICLOPENTADIENO	80.14	0.04
500		METILHEXANO	100.20	1.68
501		METILHEXENOS	98.18	0.00
501		METILHEXENOS	98.18	0.03
511		METILHEXADIENO	96.17	0.25
513	4313579	METILCICLOHEXADIENO	94.15	0.02
515		METILHEXANAL	114.19	0.92
516		METILHEPTINO	110.20	0.02
517		METILHEPTANO	114.23	0.35
518		METILCICLOHEXENO	96.17	0.14
519		METILNONANO	142.28	0.21
520		METILDECANOS	156.32	0.12
526		PENTENINO	66.10	0.03
528		HEXENO	84.16	0.40
530	142836	HEXADIENAL	96.14	0.03
531	5910869	HEPTADIENAL	110.17	0.02
532	79298	DIMETILBUTANO	86.18	2.29
533		DIMETILBUTENO	84.16	2.30
534		DIMETILPENTANO	100.20	2.36
535		DIMETILPENTENO	98.19	0.02
536		DIMETILCICLOPENTANO	98.19	0.15
537		DIMETILCICLOPENTENOS	96.17	0.22
537		DIMETILCICLOPENTENOS	96.17	0.09
539		DIMETILHEXANOS	114.23	0.48
539		DIMETILHEXANOS	114.23	0.28
540		DIMETILHEXADIENO	110.20	0.10
541		DIMETILETILCICLOHEXANO	140.26	0.09
542		DIMETILOCTANOS	142.28	0.04
542		DIMETILOCTANOS	142.28	0.02
543		DIMETILUNDECANO	184.36	0.00
546		DIMETILDECANO	170.34	0.07
550		ETILPENTENO	98.19	0.03
551		ETILCICLOPENTENO	96.17	0.06

Perfil de Especiación de GOTs (Gasolinerías) (Continuación)

Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
552		ETILMETILCICLOPENTANO	112.21	0.12
553		ETILHEXANO	114.23	0.24
554		ETILMETILHEXANO	128.26	0.21
555		ETILMETILCICLOHEXANOS	126.24	0.04
555		ETILMETILCICLOHEXANOS	126.24	0.02
556		ETILHEPTANO	128.26	0.02
557		ETILMETILOCTANO	153.31	0.02
558		ETILBICICLOHEPTANO	123.42	0.01
559		ETILDIMETILPENTANO	128.26	0.13
562		TETRAMETILCICLOBUTENO	110.19	0.04
563		TRIMETILPENTANO	114.22	0.68
564		TRIMETILPENTADIENO	110.20	0.05
565		TRIMETILHEPTANOS	142.29	0.09
565		TRIMETILHEPTANOS	142.29	0.05
566		TRIMETILHEXENO	126.24	0.04
567		TRIMETILOCTANOS	156.31	0.07
568		TRIMETILDECANO	184.36	0.03
570		OCTATRIENO	108.19	0.01
571	124118	NONENO	126.24	0.03
574		PENTADIENO	68.13	0.04
575		METILOCTANOS	128.26	0.55
623	496117	INDANO	118.18	0.44
627		TRIMETILCICLOPENTANO	112.16	0.09
628		DIMETILCICLOHEXANO	112.24	0.10
629	3073663	TRIMETILCICLOHEXANOS	126.27	0.02
635		DIMETILHEPTANOS	128.26	0.16
691		NO IDENTIFICADOS	86.00	0.00

Perfil de Especiación de GOTs (Uso Doméstico de Solventes)

Perfil de Especiación Puntual – Uso Doméstico de Solventes				
Perfil	0197			
Descripción: Uso Misceláneo no Industrial de Solventes				
Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
64	75-28-5	ISOBUTANO	58.12	5.3
137	64-17-5	ALCOHOL ETILICO	46.07	36.9
139	67-63-0	ALCOHOL ISOPROPILICO	60.09	38.5
164	111-46-6	GLICOLITER	106.14	8.3
165	57-55-6	PROPILENGLICOL	76.11	3.2
196	138-22-7	N-BUTIL ACETATO	116.16	1.3
231	50-00-0	FORMALDEHIDO	30.03	0.6
242	67-64-1	ACETONA	58.08	1.4
306	8030-30-6	NAFTA	114	4.5

Perfil de Especiación de GOTs (Uso Doméstico de Solventes)

Perfil de Especiación Puntual – Pesticidas Agrícolas				
Perfil	1003			
Descripción: Manufactura de Sustancias Químicas – Sustancias Químicas Agrícolas – Pesticidas – General				
Número	Número CAS	Nombre de la Especie	Peso Molecular	% en Peso
1		ISOMEROS DE HEXANO	86.17	8.1
11		C-7 CICLOPARAFINAS	98.19	15.4
12		C-8 CICLOPARAFINAS	112.23	1.6
14	64475-85-0	ESPIRITUS MINERALES	114.00	15.0
18		ISOMEROS DE PENTANO	72.15	3.1
56	74-98-6	PROPANO	44.09	1.8
62	106-97-8	N-BUTANO	58.12	4.4
64	75-28-5	ISOBUTANO	58.12	1.1
69	109-66-0	N-PENTANO	72.15	3.2
80	110-54-3	HEXANO	86.16	3.7
272	74-95-3	BROMURO DE METILENO	173.85	10.0
307	1330-20-7	ISOMEROS DE XILENO	106.16	15.0
318	71-43-2	BENCENO	78.11	12.3
319	108-88-3	TOLUENO	92.13	5.0

Perfil de Especiación de PM (Puntual – Caldera)

Perfil de Especiación: Puntual - Caldera		
Perfil	1003	
Descripción: Evaporación de Solventes Orgánicos – Operaciones de Recubrimiento de Superficies – Solventes – Pintura Base - General		
Número CAS	Nombre de la Especie	% en Peso
7429905	ALUMINIO	0.530
7704349	AZUFRE	13.300
7726956	BROMO	0.013
7440702	CALCIO	1.580
7440440	CARBON ELEMENTAL	2.420
	CARBONO ORGANICO	7.800
7440508	COBRE	0.075
7440473	CROMO	0.047
7439896	FIERRO	2.970
7782414	FLUORO	0.052
7439965	MANGANESO	0.046
7440020	NIQUEL	5.360
	NITRATOS	0.650
7439921	PLOMO	0.110
7440097	POTASIO	0.280
7440213	SILICE	0.960
7440235	SODIO	3.500
	SULFATO	48.100
7440326	TITANIO	0.110
7440622	VANADIO	3.440
7440666	ZINC	0.400

**Perfil de Especiación de PM
(Vehículos Automotores que Circulan por Carretera)**

Perfil de Especiación: Puntual - Vehículos Automotores que Circulan por Carretera		
Perfil	31202	
Descripción: Vehículos Automotores Ligeros sin Plomo		
Número CAS	Nombre de la Especie	% en Peso
7429905	ALUMINIO	0.815
7704349	AZUFRE	2.830
7726956	BROMO	0.200
7440702	CALCIO	0.479
7440440	CARBON ELEMENTAL	30.076
	CARBONO ORGANICO	41.331
7782505	CLORO	0.071
7440508	COBRE	0.026
7440473	CROMO	0.013
7439896	FIERRO	0.583
7723140	FOSFORO	0.373
7440553	GALIO	0.001
7439965	MANGANESO	0.016
7439976	MERCURIO	0.002
7440020	NIQUEL	0.005
7440097	POTASIO	0.020
7439921	PLOMO	0.558
7782492	SELENIO	0.002
7440213	SILICE	2.793
7440326	TITANIO	0.007
7440622	VANADIO	0.017
7440666	ZINC	0.509

APENDICE A
Hojas de Cálculo para el Modelado de Inventarios Hipotético

APENDICE B

Perfiles de Especiación de GOTs para el Modelado de Inventarios Hipotético

APENDICE C
Perfiles de Especiación de PM para el Modelado de Inventarios Hipotético

Caldera de la Fábrica

Proceso de Recubrimiento de la Fábrica

Vehículos Automotores que Circulan por Carretera

Gasolineras

Uso Doméstico de Solventes

Aplicación de Pesticidas

1.0 INTRODUCCION

Durante los últimos 25 años se han realizado numerosos estudios para resolver los problemas de la calidad del aire. Más recientemente, muchos de estos estudios se han basado en la aplicación de modelos avanzados. El modelado de la calidad del aire se utiliza con frecuencia para demostrar el cumplimiento con las normas de calidad del aire ambiente para contaminantes criterio (e. g., ozono [O₃], monóxido de carbono [CO], óxidos de nitrógeno [NO_x], etc.), o para analizar la efectividad de las diversas estrategias de control. Si bien el modelado fotoquímico ha sido empleado tradicionalmente para demostrar el cumplimiento con las normas de ozono, se espera que el modelado regional también se utilice en el futuro como herramienta para demostrar el cumplimiento con las normas regionales de partículas y otros contaminantes. Por otro lado, el modelado regional se aplica en algunas ocasiones para analizar los riesgos a la salud y/o ambientales asociados con las emisiones de contaminantes peligrosos del aire (HAPs, por sus siglas en inglés). Las tasas de emisión de contaminantes son una variable clave de estos modelos. Un modelado de inventarios de emisiones es una compilación de estas tasas de emisión de contaminantes, que posteriormente son utilizadas por un modelo de calidad del aire.

El objetivo de este manual es capacitar al lector en los pasos involucrados en el desarrollo de un modelado de inventarios, y pretende constituir un “puente” introductorio entre el Volumen IV (*Desarrollo de Inventarios de Fuentes de Area*), el Volumen V (*Desarrollo de Inventarios de Fuentes de Area*), y el Volumen VI (*Desarrollo de Inventarios de Vehículos Automotores*) de esta serie de manuales, y las guías para el usuario de herramientas específicas para el modelado de emisiones (e. g., el Geocodificado Emissions Modeling and Projections System [GEMAP] (*Sistema Geocoded para el Modelado y Proyección de Emisiones*) [Radian, 1993], y el Emissions Modeling System-95 [EMS-95] (*Sistema de Modelado de Emisiones – 95*) [U.S. EPA, 1999a], etc.). Como tal, el contenido de este documento no es específico para un modelo, sino que representa los conceptos generales del desarrollo de un modelado de inventarios y los ilustra a través del uso de figuras y ejemplos numéricos.

En la literatura técnica se encontró una gran cantidad de documentos que describen el uso del GEMAP y el EMS-95 para desarrollar el modelado de inventarios (Beidler et al., 1996; Benjey and Moghari, 1995; Bruckman, 1993; Bruckman and Oliver, 1993; Dickson and Oliver, 1991; Dickson et al., 1992; Dickson et al., 1993; Dickson etg al., 1994; Janssen, 1996; Janssen, 1998; Koerber, 1992; Mayenkar et al., 1992; y Oliver et al., 1998); y estas referencias se presentan en la Sección 10.0. Debe señalarse que el GEMAP y el EMS-95 son dos herramientas para el modelado de emisiones ampliamente utilizadas, sin embargo, es posible que existan otras. Para seleccionar la herramienta de modelado de emisiones adecuada, es necesario analizar los objetivos específicos del inventario y del modelado. La selección de un modelo de emisiones con frecuencia se hace con base en:

- La familiaridad con los modelos de emisiones existentes
- La compatibilidad de los formatos de los modelos de emisiones tanto con los datos de entrada existentes como con los requerimientos del modelo de calidad del aire.

La disponibilidad de los datos de entrada para el modelo de emisiones es esencial para el éxito del modelado, pero en general no afecta de manera significativa la selección de un modelo de emisiones particular. Todos los modelos requieren una gran cantidad de datos de entrada específicos para el sitio y para la fuente.

Los pasos técnicos que deben ejecutarse durante el desarrollo de un modelado de inventarios para alimentar los modelos de calidad del aire son los siguientes:

1. Distribución temporal – desglose de los estimados anuales de emisión en el año base del inventario en incrementos de tiempo más pequeños (generalmente en horas).
2. Distribución espacial – distribución de los estimados de emisión en el año base en celdas de cuadrantes individuales definidas sobre el dominio del inventario.

3. Especiación – desglose de las emisiones de gases orgánicos totales (GOT) o gases orgánicos reactivos (GOR) en grupos de reactividad y/o especies químicas individuales, NO_x total en óxido nítrico (NO) y bióxido de nitrógeno (NO_2), y material particulado total (PM) por tamaño de partículas y/o por especies químicas individuales.
4. Proyecciones – combinación de los estimados de emisión del año base con los factores de crecimiento y control para estimar las emisiones en años futuros.

Para instrumentar estos pasos técnicos se requieren conjuntos de datos diferentes que necesitan ser adaptados específicamente a la región geográfica de modelado y a las condiciones de operación de los tipos de fuentes dentro de esa región. Por ejemplo, los datos específicos del sitio son necesarios para los perfiles de distribución espacial y las tasas estacionales de operación. Los datos específicos de las fuentes son necesarios para los perfiles de distribución temporal (estacional, semanal, por hora), la especiación química de las emisiones y los factores de crecimiento y control. Por lo tanto, cada dominio del modelado y cada categoría de fuente requieren conjuntos específicos de datos para la distribución temporal y espacial, la especiación y la proyección de emisiones.

Muchos de los conjuntos de datos requeridos no deben ser generalizados. Por ejemplo, es probable que los patrones diarios de tráfico vehicular en la Ciudad de México sean diferentes a los de las áreas metropolitanas en la frontera entre México y los EU (e. g., Ciudad Juárez, Mexicali, etc.). Los datos adecuados necesarios para el modelo de emisiones son específicos, en muchos casos, para las condiciones dominantes en cada región y para cada tipo de fuente. En tales casos, estos datos no pueden simplemente suponerse sin afectar la validez de los resultados del modelo de emisiones. Los ejemplos incluyen los perfiles de distribución espacial, los perfiles de distribución temporal para vehículos automotores y aeropuertos, y la proyección de emisiones.

Para los conjuntos de datos en los que la suposición o generalización no afectarán los resultados, son preferibles los datos específicos para México. Sin embargo, en casos selectos cabría esperar el uso de conjuntos de datos derivados de EU, hasta que la información específica para México o para el sitio pueda ser desarrollada. Los ejemplos de estos tipos de datos incluyen emisiones, perfiles de especiación química para la mayoría de los tipos de fuente, y algunos perfiles de distribución temporal (e. g., patrones de operación para uso de solventes, etc.).

Sin embargo, se requiere una gran cantidad de datos para ejecutar los pasos de distribución temporal y espacial, especiación y proyección en un sistema de modelado de emisiones. Estos datos deben ser obtenidos para el dominio del modelado, de manera tal que los métodos descritos en este manual puedan aplicarse de manera confiable.

Con el objetivo de explicar claramente los cuatro pasos en el desarrollo de un modelado de inventarios descritos anteriormente, a lo largo de este documento se utiliza un ejemplo sencillo, que se presenta en cajas sombreadas. El ejemplo se basa en una comunidad hipotética para el modelado del inventario que se presenta en la Figura 1-1. La comunidad contiene las siguientes seis fuentes de emisión:

- Una fuente puntual (i. e., una fábrica grande) con dos fuentes de emisión separadas:
 - Una caldera para la calefacción estacional
 - Un proceso de recubrimiento de superficies.
- Vehículos automotores que circulan por carretera (i. e., automóviles ligeros de pasajeros)
- Gasolineras
- Uso de solventes por consumidores a nivel residencial
- Aplicación de pesticidas en la agricultura.

Las seis fuentes emiten GOTs, mientras que las emisiones de CO y NO_x están limitadas a las dos fuentes de combustión (i. e., la caldera de la fábrica y los automóviles ligeros). La Tabla 1-1 presenta las emisiones anuales supuestas para estas fuentes.

Tabla 1-1. Emisiones Anuales Supuestas para las Fuentes de Emisión en la Comunidad Hipotética del Modelado de Inventarios

Fuente de Emisión	GOT (Mg/año)	CO (Mg/año)	NO _x (Mg/año)
Fábrica (caldera)	200	600	400
Fábrica (recubrimiento de superficies)	300	N/A	N/A
Automóviles Ligeros	400	800	600
Gasolineras	150	N/A	N/A
Uso de Solventes por Consumidor a Nivel Residencial	200	N/A	N/A
Aplicación de Pesticidas Agrícolas	100	N/A	N/A

Mg/año = megagramos (10⁶ gramos ó 1 tonelada métrica) por año

N/A = no aplicable

Las fuentes de emisión han sido limitadas a seis, de manera tal que los diversos pasos en el desarrollo del modelado de inventarios puedan mostrarse con claridad sin que los cálculos asociados se hagan demasiado numerosos. Un modelado de inventarios real podrá contener más fuentes de emisión, y requerirá herramientas más sofisticadas para la manipulación de los datos, que los sencillos cálculos presentados en este manual. Adicionalmente, el modelo sólo manejará emisiones de GOT, CO y NO_x; se discutirán brevemente las PM y otros contaminantes, pero el foco del ejemplo estará en los tres primeros. Por último, debe señalarse que todos los valores utilizados en el modelado de inventarios hipotético son exclusivamente para propósitos de demostración, y que **NO** deben utilizarse en inventarios de modelado reales.

El resto de este manual se organiza de la siguiente manera:

- La Sección 2.0 presenta los datos y los requerimientos de cómputo para el modelado de inventarios
- La Sección 3.0 explica la distribución temporal
- La Sección 4.0 describe la distribución espacial
- La Sección 5.0 explica la especiación

- La Sección 6.0 discute la proyección de emisiones
- La Sección 7.0 presenta el ejemplo del desarrollo de un modelado de inventarios para la categoría de una fuente
- La Sección 8.0 contiene algunos análisis del modelado hipotético de inventarios como un todo
- La Sección 9.0 presenta una conclusión para este manual
- La Sección 10.0 contiene las referencias utilizadas en el desarrollo de este manual
- El Apéndice A contiene las hojas de cálculo utilizadas para el modelado de inventarios hipotético
- El Apéndice B presenta los perfiles de especiación de GOTs asociados con las categorías de fuentes utilizadas en el modelado de inventarios hipotético
- El Apéndice C presenta los perfiles de especiación de PM asociados con las categorías de fuentes utilizadas en el modelado de inventarios hipotético.

2.0 REQUERIMIENTOS PARA EL MODELADO DE INVENTARIOS

El punto de arranque para desarrollar un modelado de inventarios es una base de datos de la información relacionada con las emisiones, con frecuencia conocida como el año base del *inventario*. Es importante comprender que una hoja de cálculo que sólo contenga los estimados de las emisiones anuales para el año base no será un conjunto de datos lo suficientemente robusto como para soportar el desarrollo de un modelado de inventarios. Entre los ejemplos de otros datos relacionados con las emisiones cuya inclusión en el inventario de base anual podría ser necesaria, se encuentra la información sobre el establecimiento industrial, los tipos de materiales y rendimientos, los parámetros de chimenea, etc. En la Tabla 2-1 se presenta una amplia lista, si bien no exhaustiva, de los datos del año base del inventario necesarios para las fuentes puntuales. Las tablas 2-2 a 2-4 presentan datos similares para las fuentes de área, de vehículos automotores y biogénicas.

Tabla 2-1. Datos Típicos del Año base de un Inventario – Fuentes Puntuales

Tipo de Datos	Elemento de los Datos
Datos del Establecimiento	ID del Establecimiento Nombre del Establecimiento Código Industrial del Establecimiento– SIC, NAICS, CMAP UTMs del Establecimiento (Zonificación, coordenadas al Este y al Norte)
Datos de Chimenea	ID de la Chimenea Diámetro Interno de la Chimenea Altura de la Chimenea (sobre la superficie) Temperatura de los gases de Salida de la Chimenea Velocidad de los gases de Salida de la Chimenea Tasa de Flujo de Salida de la Chimenea Coordenadas UTM de la Chimenea (Zonificación, coordenadas al Este y al Norte) Elevación de la Chimenea (sobre el nivel del mar)
Datos del Equipo	ID del Equipo Datos del Calendario de Operación: - Rendimientos Fraccionales Mensuales - Rendimientos Fraccionales Estacionales - Operación en Semanas/Año - Operación en Días/Semanas - Operación en Horas/Día

Tabla 2-1. (Continuación)

Tipo de Datos	Elemento de los Datos
Datos del Proceso	ID del Proceso SCC Tasa/Rendimiento Anual del Proceso
Datos de Emisión	ID del Contaminante Factores Reales de Emisión Emisiones Anuales Reales Código del Equipo de Control Primario Código del Equipo de Control Secundario Eficiencia General del Equipo de Control

CMAF = Clasificación Mexicana de Actividades y Productos

ID = Número de identificación

NAICS = North American Industry Classification System (*Sistema de Clasificación Industrial de América del Norte*)

SCC = Source Classification Code (*Código de Clasificación de Fuentes*)

SIC = Standard Industrial Classification (*Clasificación Industrial Estándar*)

UTM = Mercator Transverso Universal

Tabla 2-2. Datos Típicos del año base de un Inventario – Fuentes de Area

Tipo de Datos	Elemento de los Datos
Datos de Ubicación	Código Estatal Código del Municipio
Datos de la Fuente	Código de Categoría de Area
Datos de las Emisiones	ID del Contaminante Factor de Emisión Real Factor de Emisión Permisible Estimado de la Emisión Real Estimado de la Emisión Permisible Equipo de Control Primario Equipo de Control Secundario Eficiencia de Control Base Temporal (Promedio Anual o Promedio Diario)

ID = número de identificación

Tabla 2-3. Datos Típicos del año base de un Inventario – Fuentes de Vehículos Automotores

Tipo de Datos	Elemento de los Datos
Datos de Ubicación	Código Estatal Código del Municipio
Datos de la Fuente	Clase de Vehículo Tipo de Tecnología Vehicular
Datos de las Emisiones	ID del Contaminante Código del Proceso de Emisión del Vehículo Automotor (i.e., REX, CST, HST, REV, HSK, DNL, CC) <u>Estimado de la Emisión Total Diaria a Nivel Municipal</u>

CC = emisiones del cárter

CST = emisiones de arranque en frío

DNL = emisiones diurnas

HSK = emisiones húmedas calientes

HST = emisiones de arranque en caliente

ID = identificación

REV = emisiones evaporativas en operación

REX = emisiones de escape en operación

Tabla 2-4. Datos Típicos del año base de un Inventario – Fuentes Biogénicas

Tipo de Datos	Elemento de los Datos
Datos de Ubicación	Código Estatal Código del Municipio
Datos de la Fuente	Código de la Comunidad Vegetal (i. e., Tipo de Vegetación)
Datos de la Emisión	ID del Contaminante Tipo de Dosel Flujo de Emisión Biogénica ($\mu\text{g}/\text{m}^2\text{-hr}$)

hr = hora

ID = número de identificación

 m^2 = metro cuadrado μg = microgramo

Estos datos adicionales son necesarios para soportar el modelado y sus usos finales, tales como el análisis de impactos de la fuente y la evaluación de la efectividad de las estrategias de control de la contaminación del aire. Por ejemplo, la información del establecimiento industrial puede ayudar a identificar qué sectores industriales son los principales generadores de contaminación del aire en la región del inventario, y a enfocar el desarrollo de medidas de control. Los tipos de material y rendimientos también pueden ser utilizados para refinar la estrategia de control (e. g., qué tipos de combustibles provocan la mayoría de las emisiones por combustión). Los parámetros de chimenea se utilizan en conjunto con los datos meteorológicos para modelar la dispersión y transporte de los contaminantes desde su punto de emisión. Si no existen los datos específicos precisos para el inventario, deben hacerse las suposiciones adecuadas para los datos faltantes.

Típicamente, los datos del año base del inventario incluyen campos para codificar los datos relacionados con las emisiones. En general, los sistemas de codificación están estructurados por tipo de fuente, y para facilitar la manipulación exhaustiva de datos del modelado de inventarios. Sin sistemas de codificación, el manejo de los datos sería extremadamente difícil, si no imposible. Algunos ejemplos de los sistemas de codificación utilizados con mayor frecuencia incluyen las abreviaturas de estados y municipios, clasificaciones industriales y códigos de categorías de emisión. Tales sistemas de codificación se utilizan para asignar perfiles temporales adecuados, sustitutos espaciales, y/o perfiles de especiación a los estimados de emisión. La Tabla 2-5 presenta un ejemplo de esta asignación.

Tabla 2-5. Ejemplo de un Sistema de Codificación, Asignación de Perfiles Temporales, Sustitutos Espaciales y Perfiles de Especiación

Categoría de Fuente	SCC	AMS	ID del Perfil Temporal ^a	ID del Sustituto Espacial ^b	ID del Perfil de Especiación ^c
Caldera de la Fábrica	10200601	N/A	024	N/A	0002
Gasolineras	N/A	25-01-060-000	075	99	1190
Automóviles Ligeros	N/A	22-01-001-000	051	47	1101

^a La ID del perfil temporal es un código numérico que identifica un perfil temporal específico. En esta Tabla, las identificaciones del perfil temporal son ficticias.

^b La ID del sustituto espacial es un código numérico que identifica un sustituto espacial específico. En esta Tabla, las identificaciones del sustituto espacial son ficticias.

^c La ID del perfil de especiación es un código numérico que identifica un perfil de especiación específico. En esta Tabla, las identificaciones de perfil temporal fueron obtenidas de la base de datos SPECIATE de la U.S. EPA (U.S. EPA, 1999c).

ID = número de identificación

N/A = no aplicable

SCC = Source Classification Code (*Código de Clasificación de Fuentes*)

El sistema vigente de clasificación industrial en México es la Clasificación Mexicana de Actividades y Productos (CMAP) de 1999, mientras que el sistema Standard Industrial Classification (*Clasificación Industrial Estándar*) de 1987 (OMB, 1987) es ampliamente utilizado en EU. Ambos sistemas son similares, sin embargo, cabe señalar que el North American Industry Classification System (*Sistema de Clasificación Industrial de América del Norte*) (OMB, 1997; U.S. Census, 1999), que es un sistema de clasificación industrial trinacional, está empezando a ser instrumentado en México, EU y Canadá. Otro ejemplo son los códigos de datos de ubicación industrial que se utilizan en el archivo de la base de datos UBICIND dentro del Sistema Nacional de Información de Fuentes Fijas (SNIFF) de México

Actualmente, en EU se emplean los Source Classification Codes (SCC) (*Códigos de Clasificación de Fuentes*) para fuentes puntuales, y los códigos de categoría de Area and Mobile Source (AMS) (*Fuentes de Área y Móviles*) para las fuentes de área y móviles. El Apéndice E del Volumen IV (*Desarrollo de Inventarios de Fuentes Puntuales*) presenta los listados de los códigos SCC; mientras que el Apéndice A del Volumen V (*Desarrollo de Inventarios de Fuentes de Área*) contiene los listados de códigos AMS. En este momento, México no cuenta con un sistema de códigos de categorías de emisión extenso, si bien tales sistemas son necesarios antes de que sea posible desarrollar un modelado de inventarios.

Debido al volumen de los datos involucrados, un sistema de modelado electrónico de emisiones es una necesidad para el desarrollo de un modelado de inventarios. Un sistema de modelado de emisiones es un grupo de modelos de emisiones ejecutado en una secuencia específica que procesa los estimados anuales de emisión para general valores espaciados y resueltos temporal y espacialmente, para alimentar modelos de calidad del aire fotoquímicos y regionales de otros tipos. Cada modelo de emisión es una colección integrada de procedimientos de cálculo, o algoritmos, adecuadamente codificados para un manejo basado en computadoras. Por ejemplo, el GEMAP y el EMS-95 tienen modelos de emisión distintos para fuentes puntuales, de área, de vehículos automotores y biogénicas. La Figura 2-1 identifica los distintos modelos de emisión dentro de la estructura general del GEMAP. Los sistemas de modelado de emisiones también incluyen una herramienta de Sistema de Información Geográfica (SIG) para procesar los diversos conjuntos de datos espaciales o “coberturas” (e. g., la definición del dominio del inventario, los límites políticos, población, tipo de vegetación, etc.). La herramienta SIG puede utilizarse para visualizar diferentes aspectos del modelado de inventarios, que podrían no ser evidentes con la simple observación de los datos numéricos en la base de datos del inventario.

Los modelados de inventarios tendrán grandes cantidades de datos asociados. Esto no es sorprendente, dado que los dominios de los inventarios pueden ser del orden de miles de kilómetros cuadrados con una resolución espacial requerida tan fina como 500 metros. Esto se hace todavía más complejo por la necesidad de estimaciones por hora, de potencialmente cientos de especies químicas para el gran número de categorías de fuente que abarca un modelado de inventarios de emisiones extenso. La Figura 2-2 ilustra un ejemplo conceptual específico para México del enorme volumen de datos generados con modelados de inventarios.

Un inventario de tóxicos del aire fue realizado previamente para Ambos Nogales (i. e., Nogales, Sonora; y Nogales, Arizona) (Radian, 1997). Las características del inventario incluyen:

- El dominio se distribuyó de manera equitativa entre México y EU
- El dominio midió 19 km (norte-sur) por 12 km (este-oeste)
- Celdas de cuadrante de 500 metros (número total de celdas: 912)
- Cuatro estaciones diferentes (total de 96 diferentes horas)
- 113 especies de tóxicos del aire individuales
- 103 diferentes fuentes de área y de vehículos automotores.

Si bien no todos los tóxicos del aire fueron emitidos por cada categoría de fuente, y no todas las categorías de fuente se localizaron en cada celda para el inventario de tóxicos del aire de Ambos Nogales, el número potencial total de valores de emisión especiados y resueltos espacial y temporalmente, excedieron los mil millones (1×10^9). La cantidad real de valores de emisión fue ligeramente menor. En la Figura 2-2 sólo se presentan algunas de las emisiones especiadas de solventes usados por consumidores en la Celda A1 para Nogales, Sonora, durante la Hora 3 en un día de invierno promedio. El inventario completo es mucho más grande que esto, pero no puede mostrarse en una sola figura; las otras emisiones no se presentan para conservar la claridad conceptual.

3.0 DISTRIBUCION TEMPORAL

El primer paso para el desarrollo de un modelado de inventario consiste en la distribución temporal de las emisiones. Debido a que el modelado de la calidad del aire tiene el objetivo de representar los procesos físicos y químicos reales que ocurren en un lapso específico de tiempo, es importante que la distribución temporal de las emisiones, que puede considerarse como la contabilidad de la variación de las emisiones en el tiempo, sea lo más precisa posible. La distribución temporal más sencilla es para una fuente de emisiones en estado estable que arroja emisiones con la misma tasa en todo momento. En condiciones reales, sin embargo, las fuentes de emisión pueden operar sólo durante el invierno (e. g., calefacción de espacios), no operar los domingos (e. g., numerosas fuentes comerciales o industriales), o tener picos de actividad durante determinadas horas del día (e. g., tráfico vehicular en horas pico. Las distribuciones temporales permiten modelar correctamente la variabilidad de las emisiones durante los periodos de modelado deseados y estos podrán variar dependiendo del propósito del inventario. Por ejemplo, algunos inventarios requerirán sólo un promedio de las emisiones diarias para cada estación, mientras que otros necesitarán datos más específicos para reproducir un episodio de ozono histórico de varios días.

En general, el punto de inicio para la distribución temporal en el modelado de inventarios son los estimados de emisiones anuales. Posteriormente, la distribución temporal se realiza con los *perfiles de distribución temporal*, que indican la distribución de emisiones en el periodo de desagregación seleccionado (e. g., estacional, semana, día). Los estimados de emisiones anuales primero son desagregados utilizando perfiles de distribución estacional (primavera, verano, otoño, invierno). Los perfiles de distribución semanal se utilizan para contabilizar las diferencias en los niveles de actividad típicos de los días de la semana, sábados y domingos. Finalmente, los perfiles de distribución por hora permiten estimar las diferencias por hora en las emisiones.

Los perfiles de distribución temporal por omisión estacionales, semanales y por hora, con frecuencia son incluidos en los sistemas electrónicos de modelado de emisiones. Sin embargo, para cada modelado de inventarios desarrollado, debe determinarse si el uso de los perfiles de distribución por omisión es adecuado. Para algunas categorías de fuentes, los perfiles de distribución por omisión no caracterizan con precisión la distribución temporal real de las emisiones. Si el uso de perfiles de distribución por omisión no es adecuado, entonces será necesario desarrollar algunos perfiles de distribución específicos para el inventario.

También debe señalarse que algunas aplicaciones de modelado especializadas requieren los estimados de emisión “específicos del día”. El uso de estos estimados, sin embargo, no está difundido debido a las restricciones de recursos típicas en un inventario y a la falta de datos específicos del día. En lugar de estimar las emisiones por hora utilizando las distribuciones temporales “de arriba hacia abajo”, las emisiones específicas diarias se estiman “de abajo hacia arriba”, incorporando los datos de actividad (e. g., rendimiento de materiales, horas de operación, etc.), para un día seleccionado específico. Las emisiones específicas de un día típicamente están limitadas a algunas cuantas fuentes puntuales significativas. En general, la naturaleza dispersa de otros tipos de fuente impide que los datos de actividad sean recopilados para un día específico. Sin embargo, en algunos casos las emisiones específicas de un día son estimadas para categorías de fuentes eventuales (e. g., incendios forestales, quemas controladas, aplicación agrícola de pesticidas, etc.). En la Sección 3.4 se presenta una discusión adicional sobre las emisiones específicas del día.

3.1 Perfiles de Distribución Estacional

El primer paso de la distribución temporal consiste en desglosar las emisiones anuales en cuatro subtotales de emisión estacionales, utilizando los perfiles temporales estacionales. En algunos casos, los perfiles temporales estacionales están disponibles, pero en otros, deben ser derivados de las emisiones o datos de actividad mensuales. Esto se calcula sumando la porción mensual de emisiones o datos de actividad de tres meses para una estación individual. En general, las estaciones para el modelado de inventarios, por convención, se definen como:

- Primavera (marzo, abril, mayo)
- Verano (junio, julio, agosto)
- Otoño (septiembre, octubre, noviembre)
- Invierno (diciembre, enero, febrero).

Cabe señalar que las condiciones locales pueden determinar el uso de grupos estacionales diferentes. En algunas ocasiones, pero no con frecuencia, la distribución temporal mensual se realiza como parte del desarrollo de un modelado de inventarios. Algunas fuentes arrojan emisiones a la misma tasa durante todo el año, mientras que otras tienen variaciones estacionales significativas. La Figura 3-1 muestra los perfiles de distribución temporal asumidos para dos de las fuentes del modelado de inventarios hipotético. El primero muestra una fuente de emisión que es constante a lo largo del año (i. e., el proceso de recubrimiento de la fábrica); el segundo muestra una fuente de emisión estacionalmente variable (i. e., la caldera de la fábrica utilizada para calefacción). La caldera tiene grandes emisiones durante el invierno, que es un periodo de alta demanda de calentamiento de espacios, mientras que en el verano no se registran emisiones debido a que el equipo no se utiliza en esta estación. Otros ejemplos de fuentes de emisión estacionalmente variables incluyen los vehículos automotores (debido al posible incremento en el uso durante los periodos vacacionales y de descanso), y las actividades agrícolas (debido a los requerimientos estacionales de las cosechas). Independientemente de la variabilidad estacional, todas las distribuciones estacionales (o mensuales) deben sumar 1.00 (ó 100 por ciento).

3.2 Perfiles de Distribución Semanal

Después de que la distribución estacional ha sido establecida, las emisiones deben distribuirse en una base semanal (i. e., días de la semana, sábados y domingos). Para muchas fuentes, las emisiones no son constantes a lo largo de la semana. Por ejemplo, la operación de muchos establecimientos industriales estará limitada a cinco o seis días hábiles. De manera similar, la actividad urbana y emisiones de los vehículos automotores será ligeramente diferente durante los fines de semana, lo que es influenciado en gran medida por las actividades recreativas, en comparación con los días de la semana, que son dominados por un tráfico de traslado. A diferencia de los perfiles de distribución estacional, que suman 1.00 y son fáciles de estimar a partir de las distribuciones mensuales, la determinación de los perfiles semanales es más compleja. A continuación se describen los pasos necesarios para esta actividad:

- El factor promedio diario (F_{ad}) para cualquier estación es 0.011 de las emisiones estacionales (100% dividido entre 91 días por estación).
- El factor promedio diario se convierte en factor promedio semanal (F_{wd}) multiplicándolo por la relación de la fracción diaria real de las emisiones semanales (A_{wd}), dividida entre la fracción promedio diaria de las emisiones semanales (i. e., 1 día dividido entre 7 días, o aproximadamente 0.1429).
- Los factores promedio para Sábado y Domingo (F_{sat} ; F_{sun}) son estimados de manera similar; el factor promedio diario es multiplicado por la relación de las fracciones reales para Sábado y Domingo de las emisiones semanales (A_{sat} ; A_{sun}) divididas entre la fracción promedio diaria.

Por ejemplo, suponer que una categoría de fuente opera de lunes a viernes con la misma actividad todos los días, y no trabaja sábados ni domingos. Como se menciona anteriormente, las emisiones promedio diarias son 1.1% de las emisiones estacionales totales. La fracción promedio diaria real de las emisiones semanales es de 0.200 (i. e., 1.00 dividido entre 5 días hábiles), mientras que las fracciones reales de Sábado y Domingo de las emisiones semanales son de 0.000.

A continuación se muestra el cálculo de los factores promedio para los días de la semana y para Sábado y Domingo:

$$F_{wd} = 1.1\% \times (0.200/0.1429) = 1.54\%$$

$$F_{sat} = 1.1\% \times (0.000/0.1429) = 0.00\%$$

$$F_{sun} = 1.1\% \times (0.000/0.1429) = 0.00\%$$

Los factores de distribución semanales pueden verificarse aplicando la siguiente ecuación (donde 65 es el número de días hábiles en una estación, y 13 es el número de sábados y domingos correspondientes):

$$(65 \times F_{wd}) + (13 \times F_{sat}) + (13 \times F_{sun}) = 1.00$$

$$(65 \times 0.0154) + (13 \times 0.0000) + (13 \times 0.0000) = 1.001 \approx 1.000 \quad 4$$

Si esta ecuación no se cumple correctamente, debe asumirse un error en el cálculo de los factores de distribución semanales.

3.3 Perfiles de Distribución por Hora

El paso final de la distribución temporal es el desglose de las emisiones diarias (i. e., promedio de días hábiles, sábados o domingos), en emisiones por hora. Con excepción de algunos establecimientos industriales que pueden operar al mismo nivel durante las 24 horas, la mayoría de las fuentes de emisión tendrán algún tipo de variación a lo largo del día. Por ejemplo, las emisiones de vehículos automotores típicamente tendrán valores pico diferentes durante los traslados matutino y vespertino, pero caerán a niveles muy bajos en la madrugada (i. e., 2 ó 3 am). Las emisiones de algunos establecimientos industriales estarán limitadas a un turno de ocho horas. Los perfiles de distribución por hora supuestos para estos dos ejemplos se muestran en la Figura 3-2, e indican la fracción de las emisiones diarias que se presentan cada hora. Independientemente de la variabilidad horaria, las 24 fracciones en el perfil por hora deben sumar 1.00 (ó 100 por ciento).

3.4 Emisiones Específicas por Día

En la mayoría de los modelado de inventarios es posible utilizar la distribución temporal “de arriba hacia abajo” de las emisiones anuales en periodos de tiempo progresivamente más pequeños, como se describe en las Secciones 3.1 a 3.3. Sin embargo, pueden existir algunas situaciones en las que se deseen las emisiones específicas para un día, que en particular se utilizan, por ejemplo, para modelar los eventos de altos niveles de ozono (u otros contaminantes). Las emisiones específica por día se aplican en un esfuerzo para aproximar las emisiones de un día específico lo más posible, y serán más precisas que las emisiones distribuidas temporalmente, que con frecuencia dependen de perfiles temporales por omisión. Las emisiones específicas por día se generan utilizando los datos de actividad recopilados para un día particular, o incluso para una hora específica. En general, estas emisiones son estimadas solamente para fuentes puntuales con horarios de operación y parámetros conocidos, pero también sería factible estimarlas para ciertos tipos de fuentes de área eventuales (e. g., incendios forestales, quemas controladas, aplicación agrícola de pesticidas, etc.). Las emisiones de un día específico también pueden estimarse para fuentes que son afectadas por eventos extraordinarios (e. g., alertas de calidad del aire, eventos deportivos, etc.). Sin embargo, en general, la recopilación de datos de actividad específicos para un día para todas las fuentes de un inventario completo implicaría una demanda intensiva de recursos.

3.5 Consideraciones del Tipo de Fuente

Además del proceso de distribución temporal general discutido anteriormente, existen algunos aspectos que deben ser considerados para ciertos tipos de fuentes, entre los que destacan:

Fuentes Puntuales

De manera ideal, los perfiles temporales serán asignados a nivel de proceso para todas las fuentes puntuales. Sin embargo, la disponibilidad de los datos y/o las limitaciones de recursos pueden obligar a que los perfiles temporales sean asignados en un nivel menos refinado (i. e., nivel de equipo o establecimiento). Con el objetivo de determinar los perfiles temporales adecuados, los horarios reales de operación de las fuentes puntuales deben obtenerse siempre que sea posible, típicamente a través de encuestas. Dependiendo de los requerimientos del modelo de calidad del aire seleccionado, es posible que los perfiles temporales de las fuentes puntuales deban ser ajustados para los horarios de operación en días de descanso. En la mayoría de las fuentes, deben considerarse diferentes perfiles para los niveles de actividad semanales y en fines de semana.

Fuentes de Area

Cada categoría de fuente de área típicamente tiene un perfil temporal por omisión asignado por las herramientas de modelado de emisiones. Sin embargo, los procesos de emisión y la distribución temporal para cada región de inventario son variables (e. g., las emisiones agrícolas fluctuarán en las diferentes regiones climáticas debido a los diferentes tipos de cultivo y prácticas agrícolas; el pavimento con asfalto puede prohibirse durante los meses de verano en algunas regiones, etc.). En donde sea posible, los perfiles temporales deben ser adaptados para cada inventario de emisiones. Si es necesario utilizar perfiles temporales por omisión, éstos deben ser evaluados antes del proceso de distribución temporal real, con el objetivo de determinar si son adecuados para un inventario de emisiones particular. Los perfiles temporales precisos van a mejorar en gran medida la calidad de los datos de las emisiones por hora.

Fuentes de Vehículos Automotores

Los vehículos automotores en general tienen una considerable variación temporal. La distancia recorrida varía de manera significativa de una estación a otra o de un mes a otro. Además, dependiendo de la región de inventario, los patrones de recorrido en los días de la semana también serán distintos a los de los fines de semana; los niveles de actividad vehicular en los días de descanso también serán diferentes a los días laborables. Es fundamental que los perfiles de distribución temporal para vehículos automotores refleje con precisión la actividad vehicular real para los periodos de tiempo de interés específicos.

Fuentes Naturales

Si se utilizan modelos computacionales (e. g., PCBEIS [modelo de emisiones biogénicas de la US EPA]) (U.S. EPA, 1998) para desarrollar el modelado de emisiones biogénicas o de otras fuentes naturales, la distribución temporal podría no ser necesaria, dado que ya ha sido incorporada en los modelos.

3.6 Ejemplo de Distribución Temporal

Esta parte del ejemplo se enfocará en la distribución temporal de las emisiones anuales sólo a emisiones por hora; otros pasos del desarrollo de modelado de inventarios se presentan en otras secciones de este documento. Para dar un ejemplo claro, se presenta el cálculo de un estimado de emisión por hora (i. e., emisiones por hora para la octava hora [entre 7 am y 8 am] en un día hábil promedio de verano) para una fuente de emisión (i. e., vehículos automotores que circulan por carretera). La Sección 7.0 contiene un ejemplo más detallado que muestra la secuencia de todos los pasos del modelado de inventarios; los cálculos de emisiones asociados con el ejemplo completo se presentan en el Apéndice A.

Las distribuciones temporales supuestas que están asociadas con las seis fuentes en el cuadrante hipotético del inventario se presentan gráficamente en la Figura 3-3 (perfiles mensuales), Figura 3-4 (perfiles semanales), y Figura 3-5 (perfiles diarios). Los datos numéricos de estos perfiles se encuentran en el Apéndice A. Los perfiles temporales contenidos en estas figuras son hipotéticos, y **NO** deben utilizarse en el desarrollo de modelado de inventarios reales.

Ejemplo del Cálculo

Si bien los cálculos presentados en este ejemplo son prácticamente directos, debe señalarse que fueron limitados a una estación, día, hora y categoría de fuente. Si se consideraran todas las estaciones, días, horas y categorías de fuentes, sería necesario ejecutar un gran número de cálculos, que a su vez se incrementaría aún más si se consideraran los otros pasos del modelado de inventarios (i. e., distribución espacial, especiación y proyecciones). Este gran volumen de cálculos requerirá ser ejecutado por una herramienta de modelado por computadora, y no manualmente, para reducir el tiempo de cálculo y los errores potenciales.

Paso 1 – Distribución Temporal Estacional

Durante el año, la actividad de vehículos automotores se distribuye como se muestra en la Tabla 3-1.

Tabla 3-1. Perfil de Distribución Temporal Mensual Supuesto para el Modelado de Inventarios Hipotético

Mes	Fracción de la Actividad Anual
Enero	0.081
Febrero	0.078
Marzo	0.080
Abril	0.084
Mayo	0.089
Junio	0.081
Julio	0.082
Agosto	0.083
Septiembre	0.079
Octubre	0.088
Noviembre	0.084
Diciembre	0.091
Total	1.000

La ecuación para convertir las distribuciones temporales mensuales en distribuciones temporales estacionales es la siguiente:

$$TA_s = TA_{m1} + TA_{m2} + TA_{m3}$$

Donde: TA_s = Distribución temporal estacional para la estación “s”

TA_{m1} = Distribución temporal mensual para el mes 1 de la estación “s”

TA_{m2} = Distribución temporal mensual para el mes 2 de la estación “s”

TA_{m3} = Distribución temporal mensual para el mes 3 de la estación “s”.

Las cuatro distribuciones temporales estacionales se calculan como se muestra a continuación (en este ejemplo, sólo se usa la distribución temporal estacional para el verano):

$$TA_{win} = TA_{Dec} + TA_{Jan} + TA_{Feb} = 0.091 + 0.081 + 0.078 = 0.250$$

$$TA_{spr} = TA_{Mar} + TA_{Apr} + TA_{May} = 0.080 + 0.084 + 0.089 = 0.253$$

$$TA_{sum} = TA_{Jun} + TA_{Jul} + TA_{Aug} = 0.081 + 0.082 + 0.083 = 0.246$$

$$TA_{fal} = TA_{Sep} + TA_{Oct} + TA_{Nov} = 0.079 + 0.088 + 0.084 = 0.251$$

El cálculo para las distribuciones temporales estacionales también debe ser revisado, como se muestra a continuación, para asegurar que fue ejecutado correctamente:

$$TA_{win} + TA_{spr} + TA_{sum} + TA_{fal} = 0.250 + 0.253 + 0.246 + 0.251 = 1.000 \quad 4$$

Suponiendo emisiones anuales por vehículos automotores de 400 Mg/año de GOT, 800 Mg/año de CO, y 600 Mg/año de NO_x (como se definió previamente en la Tabla 1-1), las emisiones estacionales del verano se calculan como:

$$E_{GOT,sum} = \text{Anual}_{GOT} \times TA_{sum} = 400 \text{ Mg/año} \times 0.246 = 98.4 \text{ Mg/año}$$

$$E_{CO,sum} = \text{Anual}_{CO} \times TA_{sum} = 800 \text{ Mg/año} \times 0.246 = 196.8 \text{ Mg/año}$$

$$E_{NOx,sum} = \text{Anual}_{NOx} \times TA_{sum} = 600 \text{ Mg/año} \times 0.246 = 147.6 \text{ Mg/año}$$

Paso 2 – Distribución Temporal Semanal

La distribución de la actividad semanal de los vehículos automotores se muestra en la Tabla 3-2.

Tabla 3-2. Perfil de Distribución Temporal Semanal Supuesto para los Vehículos Automotores para el Modelado de Inventarios Hipotético

Día	Fracción de la Actividad Semanal
Lunes	0.138
Martes	0.138
Miércoles	0.138
Jueves	0.138
Viernes	0.138
Sábado	0.155
Domingo	0.155
Total	1.000

A continuación se presentan las ecuaciones para convertir la distribución temporal semanal en factores promedio para los días de la semana, sábados y domingos (en este ejemplo sólo se usará la distribución temporal para días de la semana):

$$F_{wd} = F_{ad} \times (A_{wd}/0.1429) = 0.0110 \times (0.138/0.1429) = 0.0106 = 1.06\%$$

$$F_{sat} = F_{ad} \times (A_{sat}/0.1429) = 0.0110 \times (0.155/0.1429) = 0.0119 = 1.19\%$$

$$F_{sun} = F_{ad} \times (A_{sun}/0.1429) = 0.0110 \times (0.155/0.1429) = 0.0119 = 1.19\%$$

Donde:

- F_{wd} = factor de día de la semana
- F_{sat} = factor de Sábado
- F_{sun} = factor de Domingo
- A_{wd} = actividad promedio de día de la semana
- A_{sat} = actividad de Sábado
- A_{sun} = actividad de Domingo
- F_{ad} = factor promedio diario (1.00/91 días por estación)
- 0.1429 = fracción promedio diario de las emisiones semanales (ver pág. 3-5).

Los cálculos de las distribuciones temporales semanales también deben ser revisados, como se muestra a continuación, para asegurar que fueron ejecutados correctamente (donde el número de días de la semana en una estación es de 65, y el número de sábados y domingos correspondientes es de 13; ver pág. 3-6)

$$(65 \times F_{wd}) + (13 \times F_{sat}) + (13 \times F_{sun}) = (65 \times 0.0106) + (13 \times 0.0119) + (13 \times 0.0119) \\ = 0.689 + 0.1547 + 0.1547 = 0.9984 \approx 1.00 \mathbf{4}$$

Usando las emisiones de vehículos automotores calculadas para el verano (98.4 Mg/año de GOT, 196.8 Mg/año de CO, y 147.6 Mg/año de NO_x), y el factor de día de la semana calculado de 0.0106, las emisiones promedio para días de la semana en el verano se calculan como:

$$E_{GOT, sumwd} = E_{GOT, sum} \times F_{wd} = 98.4 \text{ Mg/año} \times 0.0106 = 1.043 \text{ Mg/día} \\ E_{CO, sumwd} = E_{CO, sum} \times F_{wd} = 196.8 \text{ Mg/año} \times 0.0106 = 2.086 \text{ Mg/día} \\ E_{NOx, sumwd} = E_{NOx, sum} \times F_{wd} = 147.6 \text{ Mg/año} \times 0.0106 = 1.565 \text{ Mg/día}$$

Paso 3 – Distribución Temporal por Hora

La actividad supuesta para los vehículos automotores por hora supuesta se distribuye como se muestra en la Tabla 3-3. Por convención, la Hora 1 se refiere a la primer hora del día (de la medianoche a la 1:00 am); la Hora 2 se refiere a la segunda hora del día (1:00 am a 2:00 am), y así sucesivamente. Por lo tanto, la Hora 8 se refiere a la octava hora del día (7:00 a.m. a 8:00 a.m.).

Tabla 3-3. Perfil de Distribución Temporal por Hora Supuesto para los Vehículos Automotores para el Modelado de Inventarios Hipotético

Hora	Fracción de Actividad Diaria
1	0.016
2	0.010
3	0.003
4	0.006
5	0.010
6	0.026
7	0.053
8	0.064
9	0.055
10	0.048
11	0.050
12	0.052
13	0.054
14	0.055
15	0.059
16	0.070
17	0.074
18	0.070
19	0.058
20	0.046
21	0.037
22	0.033
23	0.028
24	0.022
Total	1.000

A continuación se presentan las emisiones por hora para la Hora 8 de las emisiones promedio para un día de la semana de verano:

$$E_{\text{GOT,sum,wd,8}} = E_{\text{GOT,sum,wd}} \times F_8 = 1.043 \text{ Mg/día} \times 0.064 = 0.067 \text{ Mg/hr}$$

$$E_{\text{CO,sum,wd,8}} = E_{\text{CO,sum,wd}} \times F_8 = 2.086 \text{ Mg/día} \times 0.064 = 0.134 \text{ Mg/hr}$$

$$E_{\text{NOx,sum,wd,8}} = E_{\text{NOx,sum,wd}} \times F_8 = 1.565 \text{ Mg/día} \times 0.064 = 0.100 \text{ Mg/hr}$$

Los cálculos de las emisiones por hora para otras horas se ejecutan de la misma forma.

5.0 ESPECIACION

El tercer paso en el desarrollo de modelado de inventarios es la especiación. Este es el proceso de desagregar los contaminantes del inventario (e. g., GOT, NO_x) en componentes de especies químicas individuales (e. g., tolueno, NO₂) o grupos de especies. La necesidad de la especiación es determinada por el propósito del inventario. Las aplicaciones de inventarios que requieren una especiación detallada incluyen el modelado fotoquímico, los inventarios de tóxicos del aire, modelos de balance de masa química y modelado de visibilidad. Esta sección describe los diferentes procedimientos de especiación para diversos contaminantes y tipos de fuentes.

Dependiendo de su objetivo un inventario de emisiones particular puede incluir GOT, NO_x, óxidos de azufre (SO_x), CO, partículas suspendidas totales (TSP), partículas de diámetro inferior o igual a 10 micras (PM₁₀), o amoniaco (NH₃). Sin embargo, el modelado de inventarios puede requerir que estas emisiones sean expresadas en términos de otros contaminantes. Por ejemplo, en la mayoría de los modelos fotoquímicos es necesario que las emisiones de hidrocarburos se expresen en términos de grupos de actividad determinados o “clases” de compuestos; además, algunos modelos pueden requerir que las emisiones de NO_x sean especificadas como NO y NO₂. Por otro lado, también podría ser necesario que el material particulado (PM) se desglosara en varias fracciones de tamaño, tales como PM₁₀ y partículas de diámetro inferior o igual a 2.5 micras (PM_{2.5}).

Los modelado de inventarios pueden desarrollarse utilizando una especiación discreta (e. g., para tóxicos del aire), o especiación agrupada (e. g., para modelado fotoquímico). En general, el mecanismo de especiación pertinente será especificado por el software de modelado que se esté utilizando. Las siguientes definiciones de estos dos métodos de especiación provienen de la U. S. EPA (U. S. EPA, 1999b):

- **Especiación Discreta:** se refiere al desglose de las emisiones de un contaminante particular en compuestos químicos o clasificaciones de tamaño individuales. Por ejemplo, las emisiones de GOT de los escapes de vehículos automotores pueden estar integradas por 50 o más compuestos orgánicos identificados (e. g., benceno, hexano, formaldehído). La especiación discreta utiliza perfiles de especiación que contienen fracciones de peso para cada compuesto químico.
- **Especiación de Modelo Agrupado:** se refiere al desglose de las emisiones para un contaminante en grupos de componentes que representan numerosos compuestos discretos. Estos grupos se conocen como especies de modelo agrupado. En el caso de GOTs, las especies de modelo agrupado se desarrollan con factores de separación que son específicos para el tipo de mecanismo químico empleado por el modelo fotoquímico a ser utilizado.

5.1 Perfiles de Especiación para GOTs y PM

Existen perfiles de especiación discreta para las emisiones de GOT y PM de diversos tipos de fuentes, si bien cabe señalar que, previo a su aplicación, podría ser necesario ajustar las emisiones para tomar en cuenta cualquier componente que no haya sido incluido en el inventario de emisiones. Por ejemplo, los GOR pueden ser ajustados como GOT (conversión GOR a GOT). Este ajuste es necesario porque los factores de emisión para ciertas categorías de fuentes excluyen al metano y formaldehído y, por lo tanto, representan sólo los componentes reactivos, o GOR; sin embargo, la mayoría de los perfiles de especiación se aplican bajo el supuesto de que las emisiones representan los GOTs.

La U. S. EPA ha identificado que los siguientes compuestos tienen una reactividad fotoquímica despreciable o inexistente:

- Metano
- Etano
- Acetona

- Percloroetileno (tetracloroetileno)
- Cloruro de metileno (diclorometano)
- Metil cloroformo (1,1,1-tricloroetano)
- Diversos clorofluorocarbonos (CFCs)
- Diversos hidroclorofluorocarbonos (HCFCs)
- Diversos hidrofluorocarbonos (HFCs)
- Diversos perfluorocarbonos (PFCs).

Información adicional sobre estos compuestos, y una lista de algunos compuestos no fotoquímicos menos comunes, se presenta en el *U.S. Code of Federal Regulations* (CFR, 1997) (Código de Regulaciones Federales de EU). Este listado se actualiza periódicamente, a medida que la U. S. EPA identifica nuevos compuestos no reactivos.

Las sustancias químicas que se consideran fotoquímicamente reactivas se denominan GOR. Por definición, los GOR son un subconjunto de los GOT; son gases fotoquímicamente activos compuestos por hidrocarburos que pueden contribuir a la formación de esmog.

En algunos casos, los GOR también son conocidos como COVs. Los factores de emisión publicados en el AP-42 de la EPA (U. S. EPA, 1995) se presentan tanto como GOT como GOR/COV. Otras definiciones de hidrocarburos que ocasionalmente aparecen en la literatura de calidad del aire y de los factores de emisión incluyen: gases orgánicos no metánicos (NMOG), hidrocarburos no metánicos (NMHC), hidrocarburos totales (THC), e hidrocarburos (HC). LA Figura 5-1 ilustra la relación entre estas diversas definiciones de hidrocarburos. Las áreas sombreadas en la Figura indican los compuestos incluidos en cada definición. Las definiciones para NMOG, NMHC, THC y HC en general sólo se utilizan para procesos de combustión.

La información sobre especiación química y distribución de tamaño de partículas está disponible a través de la base de datos SPECIATE de la U. S. EPA, que contiene los perfiles de especiación para GOT y PM para más de 300 tipos de fuentes. La SPECIATE (Versión 3.0) más reciente fue desarrollada como una aplicación para Windows® (U. S. EPA, 1999c). Por otro lado, la U. S. EPA también está considerando el desarrollo de una aplicación interactiva en Internet, que permitiría a los investigadores el añadir nuevos perfiles al sistema. Los perfiles de especiación buscan distribuir las emisiones GOT o PM totales de una fuente particular en los compuestos individuales (en el caso de GOT), o en elementos y tamaños de fracción (para PM). Este desglose ha sido desarrollado para utilizarse en algunos modelos fotoquímicos y modelos de fuente-receptor (principalmente para PM). Cabe señalar que estos perfiles **no** fueron desarrollados y su uso no se recomienda para la especiación de emisiones de GOT o PM para inventarios de tóxicos del aire. El Factor Information Retrieval (FIRE) Data System (*Sistema de Recuperación de Datos de Información de Factores*) contiene los factores de emisión recomendados por la U. S. EPA para contaminantes tóxicos y de criterio. La versión del FIRE más reciente (Versión 6.22) también fue diseñada como una aplicación de Windows® (U. S. EPA, 1999d).

Los datos de especiación también pueden ser generados para aplicaciones específicas de un sitio, o por otras entidades normativas. Por ejemplo, el California Air Resources Board (ARB) (*Consejo de Recursos del Aire de California*), ha compilado perfiles de especiación para GOT y PM (ARB, 1991a; ARB, 1991b), y tiene una iniciativa permanente para actualizar los estimados de las fracciones de tamaño y la composición química de los perfiles PM, para una gran variedad de categorías de fuentes de emisión. Recientemente, el ARB ha propuesto perfiles GOT nuevos o revisados para el escape y evaporación de vehículos automotores, escape de equipo utilitarios, escapes diesel y escapes de motores de turbina en aeronaves. Los perfiles de especiación (tanto GOT como PM) para las seis categorías de fuentes en el ejemplo general, se presentan en el Apéndice B y Apéndice C, respectivamente. Si bien las emisiones de PM no fueron consideradas en el ejemplo del modelado de inventarios hipotético, los perfiles de especiación de PM en el Apéndice C se presentan con propósitos de información.

5.2 Grupos de Reactividad Fotoquímica

La especiación de sustancias químicas en grupos de reactividad es importante para las aplicaciones de modelado fotoquímico debido a que algunas especies de GOTs son mucho más reactivas que otras. Los investigadores han encontrado diferencias entre las especies de GOT en la forma en que contribuyen a la formación de ozono en la atmósfera; y han desarrollado mecanismos químicos para los modelos que predicen la transformación de los contaminantes en la atmósfera, y que se han sido evaluados con experimentos de laboratorio. Si bien se ha desarrollado una gran cantidad de mecanismos químicos, actualmente los dos más utilizados en el modelado fotoquímico son los siguientes:

- Carbon Bond IV (CB-IV) (*Enlace de Carbono IV*)
- California Statewide Air Pollution Research Center (SAPRC) (*Centro de Investigación de la Contaminación del Aire a Nivel Estatal de California*)

El mecanismo CB-IV requiere que las emisiones de GOT sean desagregadas en emisiones de especies agrupadas con base en la estructura del enlace de carbono de dichas especies. En el mecanismo SAPRC, los compuestos discretos son agrupados con base en su reactividad relativa con el radical hidroxilo (OH^\cdot). Las especies agrupadas con el CB-IV y SAPRC se presentan en la Tabla 5-1 y 5-2, respectivamente.

Otros mecanismos que pueden ser de interés para México son el Regional Acid Deposition Model Mechanism (*Mecanismo Regional del Modelo de Deposición Ácida*) Versión 2 (RADM2), y el Regional Atmospheric Chemistry Mechanism (RACM) (*Mecanismo Regional de Química Atmosférica*). Estos mecanismos se utilizan en el modelo de calidad del aire a escala regional MCCM, desarrollado por el Fraunhofer-Institut für Atmosphärische Umweltforschung (IFU) (Instituto Fraunhofer para la Investigación Ambiental Atmosférica). El mecanismo de la fase gaseosa del RADM2 utiliza 61 especies, mientras que el del RACM utiliza 71, en sus respectivos grupos de reactividad. El Instituto Nacional de Ecología (INE) de México ha indicado que actualmente parte de su personal está recibiendo capacitación sobre el modelo MCCM en Alemania.

Tabla 5-1. Especies Orgánicas del Enlace de Carbono IV

Especies Orgánicas	ID de las Especies Orgánicas
Olefinas	OLE
Parafinas	PAR
Tolueno	TOL
Xileno	XYL
Formaldehído	FORM
Aldehídos de Alto Peso Molecular	ALD2
Etileno	ETH
Metanol	MEOH
Etanol	ETOH
Isopreno	ISOP
No Reactivo	No Aplicable

Tabla 5-2. Especies Orgánicas SAPRC

Especies Orgánicas	ID de las Especies Orgánicas
Formaldehído	HCHO
Aldehídos Superiores	CCHO
Cetonas	MEK
Alquil-Nitritos	RNO3
Nitratos de peroxiacil (PAN) Análogos	PAN
Fenoles	CRES
Glioxal	GLY
Metil Glioxal	MGLY
Fragmentación Aromática no Caracterizada Producto #1	AFG1
Fragmentación Aromática no Caracterizada Producto #2	AFG2

Las emisiones de especies de modelos agrupados se calculan con factores de separación (*split factors*), que representan la cantidad (en moles) de las especies de modelos agrupados por gramo de GOT. Para cada fuente o categoría de fuente que emite GOTs, deben definirse dos o más porcentajes (sumando un total de 100 por ciento), cada uno correspondiente a la fracción de GOTs emitida como la especie del modelo agrupado.

5.3 Especiación de NO_x

Algunos modelos fotoquímicos no requieren que los óxidos de nitrógeno sean caracterizados como NO ó NO₂. En su lugar, estos modelos suponen que todos los NO_x son NO, que es la forma predominante de óxidos de nitrógeno emitida por los procesos de combustión (la fuente primaria de emisiones de NO_x). Para los modelos que requieren una diferenciación entre NO ó NO₂, deben aplicarse factores de separación. Para cada fuente o categoría de fuente que emite NO_x, deben definirse dos porcentajes (que sumen un total de 100 por ciento): uno correspondiente a la fracción de NO_x emitida como NO, y el otro correspondiente a la fracción emitida como NO₂.

Es importante indicar la forma en que los NO_x son reportados en un inventario. Las emisiones de NO_x comúnmente se expresan “como NO₂”, lo que significa que un peso molecular de 46 se atribuye tanto al NO como al NO₂, aunque el verdadero peso molecular del NO es de 30. El valor real para las emisiones de NO por peso es de 30/46 (ó 0.65) veces el valor del NO reportado “como NO₂.”

Actualmente existen pocas referencias que definan los factores de división para desglosar los NO_x en NO y NO₂ (Milligan et al., 1997). Como porcentaje general, el 97 por ciento (por peso como NO₂) de los NO_x emitidos por la mayoría de las calderas será NO. Los factores de división por omisión para todas las fuentes (incluyendo vehículos automotores) con frecuencia se dan como 90% por peso de NO (como NO₂), y 10% por peso de NO₂.

5.4 Distribución del Tamaño de PM

La información sobre la distribución del tamaño, que se utiliza para modelado de inventarios de PM₁₀, PM_{2.5} o relacionados con la visibilidad, está disponible a través de la base de datos SPECIATE de la U. S. EPA. Las fracciones de tamaño también están disponibles en el California Emission Inventory Development and Reporting System (CEIDARS) (*Sistema de Desarrollo y Reporte de Inventarios de Emisiones de California*). Las emisiones de PM₁₀ y PM_{2.5} se estiman multiplicando las emisiones PM totales por fracción de masa del tamaño de partícula deseado.

Una porción potencialmente significativa de las partículas finas (i. e., $PM_{2.5}$) está integrada por carbón elemental (CE) y carbono orgánico (co). Estos dos tipos de partículas son especialmente importantes para los modelado de inventarios relacionados con la visibilidad, debido a sus propiedades de dispersión y extinción de la luz. La información sobre CE y co es muy limitada; casi toda está relacionada con los perfiles de especiación y prácticamente no contiene datos de los factores de emisión. Algunas fuentes de información sobre CE y co son la base de datos SPECIATE de la U. S. EPA, los perfiles de especiación de COV y PM del ARB de California, y el modelado de inventarios de emisiones de EC/co desarrollado para la Cuenca Atmosférica de la Costa del Sur de California (*California's South Coast Air Basin*) por el Instituto de Tecnología de California (*California Institute of Technology*) (Hildemann et al., 1991).

5.5 Otros Contaminantes

Si bien la especiación es particular interés para los hidrocarburos, NO_x y PM, en algunos casos limitados también puede ser relevante para los SO_x . Típicamente, los óxidos de azufre son emitidos como dióxido de azufre (SO_2). El SO_2 emitido puede oxidarse como trióxido de azufre (SO_3), y posteriormente como ácido sulfúrico (H_2SO_4) o aerosoles sulfatados (SO_4^{2-}). Sin embargo, las emisiones de SO_x en general se reportan en una base SO_2 . Algunos modelos fotoquímicos como el Urban Airshed Model (UAM) (*Modelo de Cuenca Atmosférica Urbana*) requieren emisiones de SO_x especiadas, que se desagregan como SO_2 y SO_4^{2-} .

Finalmente, la especiación no es un aspecto importante de los dos otros contaminantes que son inventariados con mayor frecuencia: CO y NH_3 .

5.6 Consideraciones sobre el Tipo de Fuente

Cuando se hace especiación de emisiones, deben considerarse las características exclusivas de cada tipo de fuente. La Texas Natural Resource Conservation Commission (TNRCC) (*Comisión para la Conservación de Recursos Naturales de Texas*) ha resumido los siguientes aspectos para los diversos tipos de fuentes (TNRCC, 1999):

- **Fuentes Puntuales:** Para identificar con precisión las sustancias químicas en las emisiones de fuentes puntuales, es necesario un estudio especial de cada proceso específico. Dado que, en general esto no es económicamente factible, se utiliza un perfil de especiación para cada Código de Clasificación de Fuentes (SCC). Las industrias individuales emiten diferentes COVs. Los perfiles SCC específicos son necesarios debido a que cada proceso emite diferentes combinaciones de sustancias.
- **Fuentes de Area:** De manera similar a las fuentes puntuales, la especiación química consiste en asignar la proporción correcta de diferentes sustancias a diferentes actividades. Por ejemplo, las emisiones de cortadoras de pasto son trasladadas hacia un perfil químico, mientras que otras emisiones de tintorerías o pavimentación asfáltica de caminos hacia otros perfiles.
- **Fuentes de Vehículos Automotores:** Debido a que la composición química de las emisiones vehiculares difiere entre las diversas clases de vehículos (e. g., automóviles vs. unidades diesel de 18 ruedas), se utilizan perfiles de especiación química separados para los diferentes tipos de vehículos. De manera similar, cada tipo de vehículo puede emitir hidrocarburos de diferente forma (e. g., vapores del tanque de gasolina vs. escape), de manera tal que la composición química de cada modo de pérdida también debe identificarse.
- **Fuentes Naturales:** La composición de especies, o el tipo de vegetación en el área a ser modelada es significativa, debido a que los diferentes tipos de vegetación emiten tipos y cantidades de COVs vastamente diferentes.

5.7 Ejemplo de Especiación

Para ilustrar los conceptos descritos en esta sección, las emisiones de GOT, NO_x y PM de la caldera hipotética presentada en la Sección 1.0 son especiadas utilizando diferentes métodos. En el desarrollo del modelado de inventarios, tanto la distribución temporal como la distribución espacial normalmente deberían ser ejecutadas antes de la especiación. Sin embargo, con el objetivo de mostrar el proceso, este ejemplo aplica la especiación directamente a los estimados anuales de emisión no localizados en un cuadrante. Debido a las restricciones de espacio, no se incluyó la especiación en el ejemplo más detallado, que muestra de manera secuencial todos los pasos del desarrollo de un modelado de inventarios en la Sección 7.0, ni en los cálculos asociados con el ejemplo completo en el Apéndice A.

Ejemplo de Cálculo

Este ejemplo de cálculo se enfoca en la especiación de modelo agrupado; un ejemplo de especiación discreta puede encontrarse en la Sección 6.4 del Volumen II de esta serie de manuales (*Fundamentos de los Inventarios de Emisiones*).

También cabe señalar que las emisiones calculadas con la especiación de modelo agrupado (i. e., para modelado fotoquímico), generalmente se presentan en una base molar, más que en una base de peso. Como resultado, los estimados de emisión en este ejemplo de cálculo se presentarán en una base molar.

Primero, la base de datos SPECIATE es utilizada para determinar o identificar el perfil de especies y las especies COVs discretas para la caldera. Se parte del supuesto de que la caldera está clasificada como SCC 10500105 (Calderas de Combustión Externa – Calentadores de Espacios – Industrial – Aceite Destilado). El número de perfil asociado con esta categoría de fuente, según la SPECIATE es 0002.

A continuación, las emisiones de GOT son asignadas a categorías de especies agrupadas del mecanismo CB-IV utilizando los factores de separación del Sistema de Procesamiento de Emisiones UAM (EPS 2.0) (Tabla B-35 en el EPS 2.0), y la siguiente ecuación:

$$\text{Emisiones}_I = \text{Emisiones GOT} \times \text{SF}_I / \text{Divisor}_I$$

Donde:

Emisiones_I = Emisiones de especies de modelo agrupado I (10^6 moles/año)

GOT = Emisiones de GOT (Mg/año)

SF_I = Factor de separación para especies de modelo agrupado I (g-mole/g)

Divisor_I = Factor de conversión secundario para especies de modelo agrupado I.

Las emisiones totales de gas orgánico de la caldera se presentaron en la Sección 1.0 como 200 Mg/año. Las emisiones de las especies de modelo agrupado del CB-IV se calcularon utilizando la ecuación anterior, y se presentan en la Tabla 5-3. La Figura 5-2 muestra las especies discretas y las especies de modelo agrupado para la caldera.

Tabla 5-3. Estimados de Emisiones de Especies de Modelo Agrupado CB IV para la Caldera del Modelado de Inventarios Hipotético

Especie	SF_I (g-mole/g)	Divisor_I	Emisiones_I (10^6 moles/año)
FORM	0.0162333333	1	3.25
NR	0.0005454545	1	0.11
PAR	0.0353612035	1	7.07

La caldera hipotética emite 400 Mg/año de NO_x como NO_2 . Dados los factores de separación de por peso 90% y 10% para NO y NO_2 , respectivamente, las emisiones serían equivalentes a 360 Mg de NO por año, y 40 Mg de NO_2 por año. Sin embargo, las emisiones reales de NO serían de sólo 30/46 de 360, ó 235 Mg por año. Las emisiones molares anuales de NO y NO_2 para la caldera hipotética se estiman dividiendo las emisiones de masa anuales por el peso molecular del NO y NO_2 (30 g/mole y 46 g/mole, respectivamente). Esto arroja resultados de emisión estimados de 7.83×10^6 moles de NO por año, y 0.87×10^6 moles de NO_2 por año.

6.0 PROYECCIONES

La proyección de emisiones se refiere a la extrapolación de los estimados de emisión de línea de base (*baseline emissions*) para predecir las emisiones futuras, a partir de los niveles de actividad y controles de emisión esperados en el futuro. Los estimados de emisión proyectados con frecuencia se utilizan para planear, evaluar las medidas de control potenciales, analizar el impacto de nuevas fuentes, modelar la calidad del aire en el futuro, y evaluar la efectividad de las estrategias de control de la contaminación del aire. Un inventario de emisiones de línea de base es importante porque representa una imagen instantánea de las emisiones para un año base determinado. Sin embargo, debido a que las fuentes y sus emisiones al aire asociadas no permanecen estáticas en el tiempo, los estimados básicos podrían no representar con precisión las emisiones para un año futuro. La proyección de emisiones es un esfuerzo para cuantificar los efectos del crecimiento y de los controles de emisión en el futuro. Dado que las proyecciones buscan cuantificar el futuro desconocido, siempre existirá cierta incertidumbre relacionada con cualquier estimado de emisiones proyectado. Esta incertidumbre se puede minimizar utilizando factores de crecimiento y factores de control específicos por fuente, que casi se aproximen a las emisiones de años futuros.

Las proyecciones no se consideran como un paso en el desarrollo de un modelado de inventarios, debido a que, en general, los pasos típicos se limitan a la distribución temporal, distribución espacial y especiación. De hecho, las emisiones del modelado de inventarios que han sido distribuidas temporalmente y espacialmente especiadas usualmente no son proyectadas en el futuro. En su lugar, se proyectan los datos anuales de las emisiones básicas, que pueden ser distribuidos temporal y espacialmente, y especiados para hacer el modelado de inventarios de las emisiones.

6.1 Factores de Crecimiento

El primer componente de la proyección de emisiones es el crecimiento, que se representa en términos de factores de crecimiento, que a su vez se expresan en términos de cambio porcentual anual o cambio porcentual para un determinado número de años. Para la mayoría de las áreas en las que la calidad del aire es una preocupación, el crecimiento representará el incremento en la actividad, y se expresará como un número positivo. Sin embargo, es posible la existencia de tasas de crecimiento negativas (e. g., la transición de industrias primarias como la agricultura, a industrias de manufactura o de alta tecnología puede ocasionar que la tasa de crecimiento agrícola sea negativa). A continuación se presentan dos ecuaciones solamente para proyectar el crecimiento.

$$E_{\text{proj}} = E_{\text{base}} \times (1 + \%_{\text{ann}}/100)^y$$

Ó

$$E_{\text{proj}} = E_{\text{base}} \times (1 + \%_{\text{per}}/100)$$

Donde:

E_{proj} = Emisiones proyectadas para un año (Mg/año)

E_{base} = Emisiones del año base (Mg/año)

$\%_{\text{ann}}$ = Crecimiento anual (%)

y = Número de años entre el año base y el año proyectado

$\%_{\text{per}}$ = Crecimiento del periodo.

Usualmente, los factores de crecimiento para la proyección de emisiones se basan en las proyecciones de crecimiento industrial, poblacional y del transporte, así como los cambios en el uso del suelo. Las entidades de calidad del aire en general no requieren desarrollar sus propias proyecciones de crecimiento, dado que pueden estar disponibles a través de otras entidades. El depender de las proyecciones de los indicadores de crecimiento de otras entidades permite a las entidades de calidad del aire ahorrar recursos y mantener la consistencia con aquéllas. Sin embargo, debe tenerse cuidado para asegurar que esas proyecciones de otras entidades no contengan desviaciones inherentes que provoquen una representación equivocada del crecimiento de las emisiones.

Con frecuencia las proyecciones del crecimiento industrial se utilizan para proyectar emisiones de fuentes puntuales y algunas emisiones de fuentes de área. Existen cuatro indicadores primarios del crecimiento económico industrial. En el orden descendente de la disponibilidad típica de los datos, estos cuatro indicadores son: empleo, ingresos, valor agregado y rendimiento de la producción:

- **Empleo:** Las proyecciones de empleo son generalmente el tipo más fácilmente accesible de proyecciones. Sin embargo, no incorporan las eficiencias de producción debidas a mejoras tecnológicas.
- **Ingresos:** Los datos de ingresos incorporan los efectos de las eficiencias de producción, que podrían no ser aparentes en las proyecciones de empleo. Por ejemplo, una industria particular podría tener un incremento de 15% en sus ingresos, aunque el empleo aumentara sólo 3%.
- **Valor Agregado:** El valor agregado (i. e., el valor de un producto vendido por una empresa, menos el valor de los bienes adquiridos y utilizados para elaborar el producto; y es igual a los ingresos brutos que pueden utilizarse para salarios, rentas, intereses y utilidades), se considera que es más preciso que las proyecciones de empleo o ingresos, debido a que incorpora tanto las eficiencias de producción como la sustitución del factor de producción. Sin embargo, la información sobre el valor agregado es menos accesible que las estadísticas de empleo e ingresos.
- **Rendimiento de la Producción:** El rendimiento de la producción probablemente es el indicador más directo de la actividad de las emisiones futuras, dado que representa con mayor precisión el nivel de empleo, disponibilidad de recursos, crecimiento de capital y uso de la tecnología. Adicionalmente, el rendimiento de la producción es una medición directa de la actividad industrial; mientras que el empleo, ingresos y valor agregado son sustitutos económicos que pueden o no representar con precisión el volumen de la actividad industrial. Desafortunadamente, la información sobre el rendimiento de la producción no puede obtenerse con facilidad.

Estos cuatro indicadores del crecimiento industrial (empleo, crecimiento, valor agregado y rendimiento de la producción), con frecuencia se utilizan para proyecciones regionales de sectores industriales completos. A través de encuestas en los establecimientos individuales es posible obtener información de proyecciones más específica. Sin embargo, un estudio de información de proyecciones podría demandar grandes recursos. Además, muchos establecimientos industriales no estarán dispuestos a proporcionar la información necesaria, que con frecuencia se considera privada o confidencial. En general, los estudios de proyección de fuentes puntuales deben utilizarse sólo en aquellos casos en los que exista una industria o establecimiento dominante, cuyo crecimiento en emisiones no pueda ser caracterizado correctamente en las proyecciones industriales regionales.

El crecimiento poblacional se utiliza con menor frecuencia que los indicadores de crecimiento industrial para proyectar las actividades y emisiones futuras, pero se aplica para algunos tipos de fuentes de área sumamente dispersas (e. g., recubrimiento de superficies arquitectónicas, artes gráficas, uso de solventes comercial o doméstico, etc.). Estas fuentes de área típicamente son aquellas que se estiman utilizando los factores de emisión per cápita. Además de estos usos limitados, el crecimiento poblacional no debe ser utilizado regularmente para proyectar emisiones; sin embargo, en el caso de datos de proyecciones demasiado limitados, podría ser la única alternativa viable.

De manera ideal, los indicadores de crecimiento del transporte deben ser aplicados para proyectar las emisiones de vehículos automotores. En general, a medida en que la población de un área metropolitana crece, la actividad de los vehículos automotores (i. e., VKT) se incrementa; de hecho, tiende a incrementarse a una tasa superior que la del crecimiento poblacional. Esto se debe a que el crecimiento generalmente ocurre en los límites del área metropolitana, lo que típicamente requiere un recorrido vehicular mayor que si el crecimiento se diera en el centro del área metropolitana. De modo que el crecimiento poblacional casi siempre estimará a la baja el crecimiento del transporte. Los indicadores de crecimiento del transporte en general, deben ser derivados de modelo de demanda de recorrido; las instrucciones para utilizar estos últimos modelos quedan fuera del alcance de este manual.

Por último, los cambios en el uso del suelo deben ser considerados en la estimación de los factores de crecimiento. Las fuentes biogénicas y unas cuantas fuentes de área son las únicas directamente afectadas por los cambios en el uso del suelo. En general, las fuentes biogénicas deben mantenerse constantes entre el inventario de línea de base y el inventario de proyecciones, a menos que existan usos de suelo que alteren de manera dramática la naturaleza biológica del área (i. e., transformación de un bosque en un gran centro comercial o desarrollo residencial). Incluso estos cambios dramáticos tenderán a quedar limitados en unas pocas celdas dentro del inventario completo.

6.2 Factores de Control

Además del crecimiento, el control de emisiones es el otro componente de las proyecciones de emisiones. Los factores de control generalmente están expresados como porcentaje de las emisiones controladas con respecto a las no controladas. A continuación se discuten diversos aspectos de los factores de control.

La línea base de emisiones incluye los efectos de cualquier equipo de control que ya haya sido instalado, así como todas las normas vigentes que hayan sido implantadas para el año de la línea de base. Las emisiones de línea de base, sin embargo, **no** incluyen los efectos de las regulaciones vigentes que no hayan estado completamente instrumentadas para el año base. Estos efectos necesitarán ser incluidos en futuras proyecciones. Si bien las reducciones de emisiones debidas a estas normas no han ocurrido en la realidad, usualmente pueden hacerse estimados razonables de las reducciones esperadas, dado que la regulación asociada ya ha sido establecida. Las reducciones futuras en las emisiones debidas a la adopción de una estrategia de control en un año futuro que no ha sido claramente definida en el año base, sin embargo, son mucho más difíciles de cuantificar. A pesar de esto, tales reducciones necesitan ser incluidas en los factores de control de la proyección. La ecuación básica para mostrar los factores de control sólo en algún año dado es la siguiente:

$$E_c = E_u \times [1 - (CE/100)]$$

Donde:

- E_c = Emisiones controladas (Mg/año)
- E_u = Emisiones no controladas (Mg/año)
- CE = Eficiencia de control (%).

Si bien la ecuación anterior representa la ecuación general para el factor de control, la experiencia en el desarrollo de modelado de inventarios ha demostrado que los niveles reales de efectividad del control pueden no alcanzar los niveles esperados. Como resultado, los conceptos de efectividad de la regla (ER) y penetración de la regla (PR) deben ser incorporados a los inventarios.

La ER busca cuantificar la capacidad relativa de las regulaciones para lograr la reducción completa de las emisiones esperada del cumplimiento total con la normatividad. Las normas que son totalmente cumplidas por todas las fuentes en todo momento tendrían una ER de 100%. En el sentido opuesto, los propietarios u operadores de fuentes que ignoren regulaciones relevantes ocasionarían que la categoría de fuente relevante tuviera una ER de 0%. Con frecuencia, es difícil cuantificar el valor real para la ER, que depende de numerosos factores, incluyendo la naturaleza de la regulación y de los procedimientos de cumplimiento, así como el desempeño de la fuente para mantener y asegurar el cumplimiento en el tiempo. En EU, la U. S. EPA y otras entidades responsables de la calidad del aire, en general han utilizado un valor por omisión de ER de 80%. Sin embargo, siempre que fuera posible, deberían desarrollarse valores de ER específicos para la fuente.

La PR es una medición del grado en el que una regulación cubre las emisiones de todas las fuentes dentro de una categoría de fuentes. En los casos en las que la regulación cubre todas las fuentes dentro de una categoría, debe utilizarse una PR con valor de 100%. Sin embargo, si una regulación sólo es aplicable para los grandes establecimientos, o para establecimientos con características determinadas (e. g., que excedan ciertas cantidades de emisión, que su operación exceda un número determinado de horas anuales, que utilice determinados tipos de combustible, etc.), el valor de la PR sería menor al 100%.

Si la ER y PR son incorporadas en la ecuación básica del factor de control mostrada en la página 6-4, la ecuación se convierte en:

$$E_c = E_u \times [1 - (CE/100) \times ER \times PR]$$

Donde:

- E_c = Emisiones controladas (Mg/año)
- E_u = Emisiones no controladas (Mg/año)
- CE = Eficiencia de control (%)
- ER = Efectividad de la regla
- PR = Penetración de la regla.

En general, es deseable que las proyecciones incorporen los efectos **tanto** del crecimiento **como** del control. Como resultado, la ecuación del factor de crecimiento y las del factor de control necesitan ser combinadas en la ecuación general que se presenta a continuación:

$$E_{proj} = E_u \times [1 - (CE/100) \times ER \times PR] \times (1 + \%_{ann}/100)^y$$

Donde:

- E_{proj} = Emisiones anuales proyectadas con controles (Mg/año)
- E_u = Emisiones no controladas del año base (Mg/año)
- CE = Eficiencia de control (%)
- ER = Efectividad de la regla
- PR = Penetración de la regla
- $\%_{ann}$ = Crecimiento anual (%)
- y = Numero de años entre el año base y el año proyectado.

6.3 Consideraciones del Tipo de Fuente

Dado que las proyecciones se desarrollan a partir de estimados de emisión anuales, deben revisarse algunas consideraciones específicas para el tipo de fuente. Primero, algunas fuentes puntuales cuentan con permisos de operación emitidos por entidades normativas, que con frecuencia especifican los límites de emisión diarios o anuales como condiciones para la operación de un equipo. Cuando los estimados de emisión del año base de este tipo de fuente puntual autorizada son proyectados a un año futuro, los estimados de emisión del año futuro deben incrementarse sólo hasta el nivel permitido. El proyectar emisiones que rebasaran el nivel autorizado representaría una infracción al permiso por parte del establecimiento.

Si bien en este momento no son utilizados en México, los posibles efectos de la compensación, intercambio y comercialización de emisiones, así como otras estrategias de control basadas en el mercado, deberían ser manejadas por las proyecciones de años futuros. Una discusión detallada de estas estrategias de control rebasa los límites de este manual, pero se espera jueguen un papel más importante en la calidad del aire del futuro.

Para los vehículos automotores, un tipo de fuente significativo en la mayoría de los inventarios de emisiones, es importante que las futuras medidas de control sean adecuadamente incorporadas en los estimados de emisiones en años futuros. Por ejemplo, los estándares de emisiones de vehículos nuevos, los programas de inspección y mantenimiento (I/M) y las reformulaciones de los combustibles, tendrán un efecto significativo en las emisiones de años futuros. Estos controles pueden ser incluidos en los archivos de entrada de un modelo de factores de emisión (e. g., modelos del tipo MOBILE), pero debe ponerse atención a las clases de la flota vehicular que serán afectadas por estos controles.

6.4 Ejemplo de Proyección

Esta parte del ejemplo se centra en la proyección de emisiones anuales en años futuros. Como se mencionó anteriormente, las proyecciones no deben ser consideradas como un paso del modelado de inventarios. Sin embargo, los datos de las emisiones anuales del año base con frecuencia son proyectadas, y posteriormente, distribuidas temporal y espacialmente, y especiadas para crear un modelado de inventarios de las emisiones proyectadas. Con el objetivo de dar una clara ilustración de las proyecciones de años futuros, los factores de crecimiento y control serán aplicados a las emisiones anuales para una categoría de fuente. El cálculo de una proyección simplificada se incluye en el ejemplo más detallado que muestra todos los pasos de desarrollo de un modelado de inventarios, y que se presenta en la Sección 7.0. Sin embargo, las emisiones proyectadas no se incluyen en las hojas de cálculo del Apéndice A, debido a su gran volumen.

Ejemplo de Cálculo

Las emisiones de la categoría de uso residencial de solventes se van a proyectar desde el año base 1999 hasta el año 2010. Las emisiones anuales del año base de esta categoría se han estimado en 200 Mg/año. Las emisiones del uso residencial de solventes típicamente se incrementan utilizando las proyecciones poblacionales; la entidad de planeación local ha estimado que la población en la comunidad del inventario hipotético crecerá a una tasa anual de 2.3%. Una regulación que limita la cantidad de GOTs contenidos en productos personales (una parte de la categoría del uso residencial de solventes), será implementada en el año 2003. Esta regulación reduce el contenido de GOTs en 50%. Sin embargo, debido a problemas esperados durante la implementación, se considera que inicialmente la Efectividad de la Regla será baja: 10% en el primer año de la regulación (2003), con un incremento del 10% para cada año subsecuente hasta un máximo del 80% en el octavo año (2010). Las emisiones del uso de productos personales integra el 35% de las emisiones totales del uso residencial de solventes.

Si sólo se consideran los factores de crecimiento, las emisiones del uso doméstico de solventes incrementarían a 256.8 Mg/año en el año 2010, como se muestra en la Curva A de la Figura 6-1. El cálculo de la proyección, sólo del crecimiento, hasta el año 2005 es:

$$E_{\text{proj}} = E_{\text{base}} \times (1 + \%_{\text{ann}}/100)^y$$

$$E_{2005} = E_{1999} \times (1 + 2.3/100)^{(2005-1999)}$$

$$E_{2005} = (200 \text{ Mg/año}) \times (1.023)^6 = 229.2 \text{ Mg/año}$$

Si sólo se consideran los factores de control, las emisiones del uso doméstico de solventes se reduciría a 172.0 Mg/año en el año 2010, como se muestra en la Curva B de la Figura 6-1. El cálculo de la proyección, sólo del control, hasta el año 2005 es:

$$E_c = E_u \times [1 - (CE/100) \times ER \times PR]$$

$$E_{c,2005} = E_{u,2005} \times [1 - (50/100) \times 0.3 \times 0.35]$$

$$E_{c,2005} = (200 \text{ Mg/año}) \times [1 - 0.0525] = 189.5 \text{ Mg/año}$$

Si ambos factores de crecimiento y control se consideran en conjunto, las emisiones del uso doméstico de solventes se incrementarían a 220.9 Mg/año en el año 2010, como se muestra en la Curva C de la Figura 6-1. Debe señalarse que estas emisiones son 14% menores que si los límites para COVs no hubieran sido definidos. El cálculo de la proyección del crecimiento y controles hasta el año 2005 es:

$$E_{\text{proy}} = E_u \times [1 - (CE/100) \times ER \times PR] \times (1 + \%_{\text{ann}}/100)^y$$

$$E_{\text{proy}} = (200 \text{ Mg/año}) \times [1 - (50/100) \times 0.3 \times 0.35] \times (1 + 2.3/100)^6$$

$$E_{\text{proy}} = (200 \text{ Mg/año}) \times (0.9475) \times (1.1462) = 217.2 \text{ Mg/año}$$

Este ejemplo ilustra que las proyecciones de emisiones en años futuros puede ser influenciado de manera significativa por el crecimiento. Como se muestra en el ejemplo, los efectos del crecimiento pueden inhibir cualesquier reducciones en las emisiones generadas por los controles. Si bien la reducción de emisiones para productos personales debidos a los límites para VOCs es significativa (i. e., 50%), el efecto general de ésta dentro de toda la categoría de uso doméstico de solventes es mucho menor, debido a la lenta implementación de ocho años, y al estrecho objetivo (i. e., sólo el 35% de la categoría de uso doméstico de solventes fue afectado). Un ejemplo de la vida real que muestra la influencia del crecimiento en las emisiones de años futuros puede observarse con los vehículos automotores en EU. Los avances tecnológicos han reducido las emisiones de los vehículos automotores (en una base por millas), en un orden de magnitud o más, en comparación con hace 20 ó 30 años, pero el permanente crecimiento del recorrido vehicular (que típicamente excede el crecimiento poblacional), ha contrapesado gran parte de las emisiones logradas.

7.0 EJEMPLO DEL DESARROLLO DE UN MODELO DE INVENTARIOS

Esta sección presenta un amplio ejemplo para una categoría de fuente, e ilustra la distribución temporal, distribución espacial, especiación y proyección realizadas de manera secuencial. Para este ejemplo se seleccionó la gasolinería como categoría de fuente. Las hojas de cálculo detalladas para esta categoría y las otras categorías en este modelo de inventarios hipotético pueden encontrarse en el Apéndice A. Las cifras calculadas en este ejemplo se identifican en el Apéndice A con un texto en **negritas** y celdas sombreadas. Para los modelos de inventarios reales, será necesario utilizar un sistema electrónico. Las hojas de cálculo presentadas en este documento se incluyen sólo para propósitos de demostración, **no** deben utilizarse para el modelado de inventarios reales.

7.1 Distribución Temporal

Los perfiles temporales supuestos para la gasolinería se presentaron en la Figura 3-3 (estacionales), Figura 3-4 (semanales) y Figura 3-5 (por hora).

El primer paso en la distribución temporal consiste en determinar los factores de distribución estacional. La actividad mensual de la gasolinería supuesta para este ejemplo se presenta en la Tabla 7-1 (esta distribución mensual es idéntica a la supuesta para los vehículos automotores presentada en la Sección 3.6).

Tabla 7-1. Perfil de Distribución Temporal Mensual Supuesto para la Gasolinería para el Modelado de Inventarios Hipotético

Mes	Fracción de Actividad Anual
Enero	0.081
Febrero	0.078
Marzo	0.080
Abril	0.084
Mayo	0.089
Junio	0.081
Julio	0.082
Agosto	0.083
Septiembre	0.079
Octubre	0.088
Noviembre	0.084
Diciembre	0.091
Total	1.000

Las distribuciones temporales estacionales se estiman como:

$$TA_s = TA_{m1} + TA_{m2} + TA_{m3}$$

$$TA_{inv} = TA_{Dic} + TA_{Ene} + TA_{Feb} = 0.091 + 0.081 + 0.078 = 0.250$$

$$TA_{pri} = TA_{Mar} + TA_{Abr} + TA_{May} = 0.080 + 0.084 + 0.089 = 0.253$$

$$TA_{ver} = TA_{Jun} + TA_{Jul} + TA_{Ago} = 0.081 + 0.082 + 0.083 = 0.246$$

$$TA_{oto} = TA_{Sep} + TA_{Oct} + TA_{Nov} = 0.079 + 0.088 + 0.084 = 0.251$$

También se muestra la revisión de los cálculos de las distribuciones estacionales.

$$TA_{inv} + TA_{pri} + TA_{ver} + TA_{oto} = 0.250 + 0.253 + 0.246 + 0.251 = 1.000 \quad 4$$

Dadas emisiones anuales de GOTs de 150 Mg/año (mostrados en la Tabla 1-1), las emisiones estacionales se calculan como:

$$E_{TOG,inv} = Anual_{TOG} \times TA_{inv} = 150 \text{ Mg/año} \times 0.250 = 37.50 \text{ Mg}$$

$$E_{TOG,pri} = Anual_{TOG} \times TA_{pri} = 150 \text{ Mg/año} \times 0.253 = 37.95 \text{ Mg}$$

$$E_{TOG,ver} = Anual_{TOG} \times TA_{ver} = 150 \text{ Mg/año} \times 0.246 = 36.90 \text{ Mg}$$

$$E_{TOG,oto} = Anual_{TOG} \times TA_{oto} = 150 \text{ Mg/año} \times 0.251 = 37.65 \text{ Mg}$$

Después de calcular las emisiones estacionales, el siguiente paso consiste en estimar las emisiones en una base semanal. La actividad semanal supuesta para la gasolinería se presenta en la Tabla 7-2 (esta distribución semanal también es idéntica la distribución de la actividad supuesta para los vehículos automotores presentada en la Sección 3.6).

Tabla 7-2. Perfil de Distribución Semanal Supuesta para la Gasolinería para el Modelado de Inventarios Hipotético

Día	Fracción de la Actividad Semanal
Lunes	0.138
Martes	0.138
Miércoles	0.138
Jueves	0.138
Viernes	0.138
Sábado	0.155
Domingo	0.155
Total	1.000

A continuación se presentan las ecuaciones para convertir la distribución temporal semanal en días de la semana promedio, sábado y domingo:

$$F_{\text{sem}} = F_{\text{ad}} \times (A_{\text{sem}}/0.1429) = 0.0110 \times (0.138/0.1429) = 0.0106 = 1.06\%$$

$$F_{\text{sab}} = F_{\text{ad}} \times (A_{\text{sab}}/0.1429) = 0.0110 \times (0.155/0.1429) = 0.0119 = 1.19\%$$

$$F_{\text{dom}} = F_{\text{ad}} \times (A_{\text{dom}}/0.1429) = 0.0110 \times (0.155/0.1429) = 0.0119 = 1.19\%$$

También se muestra la revisión de los cálculos de las distribuciones temporales semanales:

$$\begin{aligned} (65 \times F_{\text{sem}}) + (13 \times F_{\text{sab}}) + (13 \times F_{\text{dom}}) &= (65 \times 0.0106) + (13 \times 0.0119) + (13 \times 0.0119) \\ &= 0.689 + 0.1547 + 0.1547 = 0.9984 \approx 1.00 \end{aligned}$$

Utilizando las emisiones estacionales calculadas para la gasolinería (primavera – 37.95 Mg, verano – 36.90 Mg, otoño – 37.65 Mg, e invierno – 37.50 Mg), y las distribuciones semanales calculadas ($F_{\text{sem}} = 0.0106$, $F_{\text{sab}} = 0.0119$, y $F_{\text{dom}} = 0.0119$), las emisiones distribuidas semanalmente se calculan como se presenta a continuación. Este cálculo es sólo para los días de la semana; las demás emisiones distribuidas se calculan de manera similar, y los resultados se presentan en la Tabla 7-3.

$$E_{\text{TOG,ver,sem}} = E_{\text{TOG,ver}} \times F_{\text{sem}} = 36.90 \text{ Mg} \times 0.0106 = 0.392 \text{ Mg/día}$$

Tabla 7-3. Emisiones Estimadas Distribuidas Semanalmente para la Gasolinería para el Modelado de Inventarios Hipotético

	Día de la Semana (Mg/día)	Sábado (Mg/día)	Domingo (Mg/día)
Primavera	0.403	0.452	0.452
Verano	0.392	0.440	0.440
Otoño	0.400	0.449	0.449
Invierno	0.398	0.447	0.447

Después de determinar las emisiones para día de la semana promedio, sábado y domingo para cada una de las cuatro estaciones, el siguiente paso consiste en distribuir la actividad diaria de la gasolinería en una base por hora individual. La actividad por hora supuesta para la gasolinería se distribuye como se muestra en la Tabla 7-4; se supone que la distribución es igualmente aplicable para días de la semana promedio, sábados y domingos. Debe observarse que la Hora 1 se refiere a la primer hora del día (medianoche a 1 a.m.), la Hora 2 se refiere a la segunda hora del día (1 a.m. a 2 a.m.), y así sucesivamente. También se presenta una verificación para confirmar que la suma las fracciones de actividad diaria arroje un resultado de 1.000.

Tabla 7-4. Perfil de Distribución Temporal por Hora Supuesto para la Gasolinería para el Modelado de Inventarios Hipotético

Hora	Fracción de Actividad Diaria
1	0.009
2	0.009
3	0.009
4	0.009
5	0.009
6	0.009
7	0.043
8	0.043
9	0.043
10	0.043
11	0.043
12	0.043
13	0.043
14	0.043
15	0.043
16	0.043
17	0.086
18	0.086
19	0.086
20	0.086
21	0.060
22	0.060
23	0.026
24	0.026
Total	1.000 4

Las emisiones por hora para un día de la semana promedio en verano se calculan como:

$$E_{\text{TOG,ver,sem,18}} = E_{\text{TOG,ver,sem}} \times F_{18} = 0.392 \text{ Mg/día} \times 0.086 = 0.034 \text{ Mg/hr}$$

El cálculo de todas las demás emisiones por hora es idéntico. Los resultados para días de la semana promedio (Ds), sábado (Sab) y domingo (Dom) en Mg por hora, redondeados a tres cifras decimales se presentan en la Tabla 7-5.

Tabla 7-5. Emisiones por Hora Estimadas Distribuidas Temporalmente para el Modelado de Inventarios Hipotético

Hr	Primavera (Mg/hr)			Verano (Mg/hr)			Otoño (Mg/hr)			Invierno (Mg/hr)		
	Ds	Sáb	Dom	Ds	Sáb	Dom	Ds	Sáb	Dom	Ds	Sáb	Dom
1	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004
2	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004
3	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004
4	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004
5	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004
6	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004
7	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
8	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
9	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
10	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
11	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
12	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
13	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
14	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
15	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
16	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019	0.017	0.019	0.019
17	0.035	0.039	0.039	0.034	0.038	0.038	0.034	0.039	0.039	0.034	0.038	0.038
18	0.035	0.039	0.039	0.034	0.038	0.038	0.034	0.039	0.039	0.034	0.038	0.038
19	0.035	0.039	0.039	0.034	0.038	0.038	0.034	0.039	0.039	0.034	0.038	0.038
20	0.035	0.039	0.039	0.034	0.038	0.038	0.034	0.039	0.039	0.034	0.038	0.038
21	0.024	0.027	0.027	0.024	0.026	0.026	0.024	0.027	0.027	0.024	0.027	0.027
22	0.024	0.027	0.027	0.024	0.026	0.026	0.024	0.027	0.027	0.024	0.027	0.027
23	0.010	0.012	0.012	0.010	0.011	0.011	0.010	0.012	0.012	0.010	0.012	0.012
24	0.010	0.012	0.012	0.010	0.011	0.011	0.010	0.012	0.012	0.010	0.012	0.012

7.2 Distribución Espacial

Después de que se ha ejecutado la distribución temporal de emisiones, se realiza la distribución espacial. La distribución espacial para la gasolinería se presentó en la Figura 4-4. Cabe señalar que la distribución espacial indica que una tercera parte de las emisiones de la gasolinería se localizan en la Celda A1, y dos tercios en la Celda A3. Las emisiones de la gasolinería en las otras siete celdas (i. e., Celdas A2, B1, B2, B3, C1, C2 y C3) serán de cero. Sin embargo, cuando se aplica un sistema de modelado de inventarios, se calcularán todos los valores potenciales.

Al utilizar las emisiones por hora calculadas de la Tabla 7-5 y las distribuciones temporales de la Figura 4-4 (Celda A1 = 0.333, Celda A3 = 0.667, y todas las demás celdas = 0.000), las emisiones por hora distribuidas espacialmente se calculan como:

$$E_{\text{TOG,ver,sem,18,A1}} = E_{\text{TOG,ver,sem,18}} \times SS_{A1} = 0.034 \text{ Mg} \times 0.333 = 0.011 \text{ Mg}$$

Este cálculo es solamente para la Celda A1 y la Hora 18 de un día promedio de verano. Otras emisiones distribuidas se calculan de manera similar, y los resultados se muestran en las Tablas 7-6 y 7-7. Todos los valores de las emisiones están redondeados a tres cifras decimales.

Tabla 7-6. Emisiones Estimadas Distribuidas Espacialmente para la Gasolinería (Celda A1) para el Modelado de Inventarios Hipotético

Celda A1	Primavera (Mg/hr)			Verano (Mg/hr)			Otoño (Mg/hr)			Invierno (Mg/hr)			
	Hr	Ds	Sáb	Dom	Ds	Sáb	Dom	Ds	Sáb	Dom	Ds	Sáb	Dom
1	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
2	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
3	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
4	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
5	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
6	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
7	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
8	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
9	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
10	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
11	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
12	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
13	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
14	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
15	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
16	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006	0.006
17	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.013
18	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.013
19	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.013
20	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.013
21	0.008	0.009	0.009	0.008	0.009	0.009	0.008	0.009	0.009	0.008	0.009	0.009	0.009
22	0.008	0.009	0.009	0.008	0.009	0.009	0.008	0.009	0.009	0.008	0.009	0.009	0.009
23	0.003	0.004	0.004	0.003	0.004	0.004	0.003	0.004	0.004	0.003	0.004	0.004	0.004
24	0.003	0.004	0.004	0.003	0.004	0.004	0.003	0.004	0.004	0.003	0.004	0.004	0.004

Tabla 7-7. Emisiones Estimadas Distribuidas Espacialmente para la Gasolinería (Celda A3) para el Modelado de Inventarios Hipotético

Celda A3	Primavera (Mg/hr)			Verano (Mg/hr)			Otoño (Mg/hr)			Invierno (Mg/hr)		
	Hr	Ds	Sáb	Dom	Ds	Sáb	Dom	Ds	Sáb	Dom	Ds	Sáb
1	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003
2	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003
3	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003
4	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003
5	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003
6	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003	0.002	0.003	0.003
7	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
8	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
9	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
10	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
11	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
12	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
13	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
14	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
15	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
16	0.012	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013	0.011	0.013	0.013
17	0.023	0.026	0.026	0.022	0.025	0.025	0.023	0.026	0.026	0.023	0.026	0.026
18	0.023	0.026	0.026	0.022	0.025	0.025	0.023	0.026	0.026	0.023	0.026	0.026
19	0.023	0.026	0.026	0.022	0.025	0.025	0.023	0.026	0.026	0.023	0.026	0.026
20	0.023	0.026	0.026	0.022	0.025	0.025	0.023	0.026	0.026	0.023	0.026	0.026
21	0.016	0.018	0.018	0.016	0.018	0.018	0.016	0.018	0.018	0.016	0.018	0.018
22	0.016	0.018	0.018	0.016	0.018	0.018	0.016	0.018	0.018	0.016	0.018	0.018
23	0.007	0.008	0.008	0.007	0.008	0.008	0.007	0.008	0.008	0.007	0.008	0.008
24	0.007	0.008	0.008	0.007	0.008	0.008	0.007	0.008	0.008	0.007	0.008	0.008

7.3 Especiación

Después de terminar la distribución espacial de emisiones, se lleva a cabo la especiación. El perfil de especiación de GOTs para las gasolineras se presenta en el Apéndice B. Debido al gran número de cálculos que requeriría la especiación de cada estimado de emisión por hora, distribuido espacialmente, estos cálculos no se incluyen en esta sección ni en el Apéndice A. Los ejemplos de especiación se presentan en la Sección 5.0.

7.4 Proyecciones

Como parte de este ejemplo, se calculará un factor de proyección hipotético que puede ser aplicado a las emisiones estimadas previamente distribuidas espacial y temporalmente. En general, las proyecciones se requieren cuando se desea una estimación de las emisiones futuras que incluya los efectos del crecimiento y los controles.

El escenario de proyección utilizado aquí es para un año proyectado 10 años después del año base. Se utilizarán las emisiones del año base de las gasolineras (i. e., 150 Mg/año). Se estima que la población en el dominio del inventario tendrá una tasa de crecimiento anual del 1.3%. Durante los 10 años entre el año base y el año proyectado, como estimado general, se supone que el rendimiento de las gasolineras tendrá una tasa de crecimiento anual similar a la tasa de crecimiento poblacional. Adicionalmente, se estima que las diversas estrategias de control a ser implementadas durante el año base y el año proyectado, tendrán una eficiencia de control del 40% con respecto a las emisiones no controladas. Se supone que tanto la Efectividad de la Regla (ER) como la Penetración de la Regla (PR) serán del 90%.

A continuación se presentan los cálculos para estimar las emisiones proyectadas:

$$\begin{aligned} E_{\text{proj}} &= E_u \times [1 - (\text{CE}/100) \times \text{ER} \times \text{PR}] \times (1 + \%_{\text{ann}}/100)^y \\ E_{\text{proj}} &= (150 \text{ Mg/año}) \times [1 - (40/100) \times 0.9 \times 0.9] \times (1 + 1.3/100)^{10} \\ E_{\text{proj}} &= (150 \text{ Mg/año}) \times [0.676] \times (1.1379) = 115.4 \text{ Mg/año} \end{aligned}$$

El factor de proyección entonces se calcula dividiendo las emisiones proyectadas entre las emisiones del año base como se muestra a continuación:

$$F_{\text{proj}} = E_{\text{proj}}/E_u = (115.4 \text{ Mg/año})/(150 \text{ Mg/año}) = 0.769$$

Suponiendo que los efectos del crecimiento y control están distribuidos de manera homogénea en todo el cuadrante del dominio de modelado, durante todos los periodos de tiempo, entonces las emisiones del año base distribuidas temporal y espacialmente pueden multiplicarse por un factor de 0.769 para obtener las emisiones del año proyectado distribuidas temporal y espacialmente. Si el supuesto de que los efectos del crecimiento y control están distribuidos de manera homogénea en todo el cuadrante del dominio de modelado no es válido, entonces todo el proceso de desarrollo del modelado de inventarios deberá ser realizado con los estimados de emisión anuales del año de inventario proyectado.

8.0 RESUMEN DEL MODELADO DE INVENTARIOS HIPOTETICO

Uno de los principales beneficios de un modelado de inventarios es que es posible desarrollar un gran volumen de datos complejos para ser alimentados en los modelos de calidad del aire. Adicionalmente, este conjunto de datos puede ser analizado para determinar si el modelado de inventarios representa adecuadamente los procesos de emisión reales. A continuación se presentan algunos análisis representativos derivados del modelado de inventarios hipotético.

La Figura 8-1 presenta la distribución por hora de las emisiones de GOT en un día promedio de verano (totales y por categoría de fuente individual), para el dominio de inventario hipotético. La Tabla 8-1 ilustra las emisiones específicas por fuente que son distribuidas para la Hora 12.

Tabla 8-1. Emisiones de GOT para la Hora 12 de un Día de la Semana de Verano para el Modelado de Inventarios Hipotético

Categoría de Fuente	Emisiones (Mg/hr)
Puntual – Caldera	0.000
Puntual – Proceso	0.144
Vehículos que Circulan por Carreteras	0.054
Gasolineras	0.017
Uso Doméstico de Solventes	0.041
Pesticidas	0.080
Total	0.336

Como se esperaba, la distribución por hora presenta un pico durante el periodo diurno, que es afectado principalmente por el proceso de recubrimiento en la fábrica y, en menor grado, por el uso de pesticidas agrícolas. Las emisiones de vehículos automotores que circulan por carretera se presentan durante todo el día, y son la principal fuente de emisiones durante las horas del periodo nocturno. Dados los perfiles temporales que fueron supuestos para este inventario, estos resultados son razonables.

La Figura 8-2 presenta la distribución total por hora de las emisiones de GOT para un día de la semana de verano e invierno, para todo el dominio del inventario hipotético. La curva de verano es idéntica a la curva total de la Figura 8-1, sin embargo, la escala es diferente. Las curvas de verano e invierno “se siguen” entre sí con claridad desde la tarde hasta las primeras horas de la mañana, pero las emisiones de invierno son considerablemente mayores que las de verano. La principal razón para esta diferencia es que se supone que la caldera de la fábrica opera en un nivel significativo durante el invierno, y que no opera en el verano. Cabe resaltar que estos resultados parecen coincidir con los perfiles temporales que fueron supuestos para este inventario.

La Figura 8-3 muestra las emisiones de GOTs para un día de la semana en verano para el modelado de inventarios hipotético por celda. Las barras sombreadas muestran la contribución relativa de emisiones por parte de cada categoría de fuente. Las emisiones del proceso de recubrimiento de la fábrica son la fuente más grande localizada en la Celda B3. Emisiones significativas de las gasolineras y los vehículos automotores que circulan por carretera también se localizan en las Celdas A1 y A3. Si bien los pesticidas son la única categoría de fuente emisora en las Celdas C1 y C2, su contribución podría ser significativa.

La distribución relativa de las emisiones totales en la Figura 8-3 sería diferente si se analizaran horas específicas. Asimismo, la distribución de emisiones sería diferente si se analizaran diferentes contaminantes, estaciones o días. Por ejemplo, si se examinara la distribución de CO en un día de la semana de verano, no habría emisiones ubicadas en las Celdas B1, B2, C1 y C2. Sólo aquellas celdas con fuentes de combustión (e. g., vehículos automotores que circulan por carretera) tendrían emisiones de CO. De manera similar, el valor pico de las emisiones de GOT en un día de la semana localizado en la Celda B3 (con respecto a otras celdas) sería más pronunciado en el invierno, debido a que la caldera de la fábrica estaría en operación,

además del proceso de recubrimiento, que funciona todo el año. Finalmente, si se analizaran las emisiones de fin de semana, en lugar de las emisiones de los días de la semana, no habría un valor pico para las emisiones de GOTs en la Celda B3 (con respecto a otras celdas), debido a que la fábrica no trabaja sábados ni domingos; los niveles de las emisiones de GOTs en esa celda serían comparables a los de las otras.

Los análisis presentados en las Figuras 8-1, 8-2 y 8-3 son más directos que aquellos asociados con un modelado de inventarios típico; sin embargo, demuestran las capacidades analíticas que están disponibles a través del uso de modelado de inventarios.

9.0 CONCLUSION

Como se mencionó anteriormente, las hojas de cálculo que integran el Apéndice A contienen todos los cálculos utilizados para distribuir las emisiones temporal y espacialmente en el ejemplo del modelado de inventarios de este documento. Debido a su gran volumen, el Apéndice A no incluye los cálculos de especiación ni los cálculos de las proyecciones. Las 66 páginas que integran el Apéndice A se refieren sólo a la distribución temporal y espacial para las seis categorías de fuentes y las nueve celdas que se incluyeron en el ejemplo del modelado de inventarios hipotético utilizadas.

Si bien el ejemplo del modelado de inventarios presentado en este documento fue simplificado con respecto al modelado de inventarios real, los cuatro pasos del desarrollo de un modelado de inventarios (i. e., distribución temporal, distribución espacial, especiación y proyección) son los métodos fundamentales que se utilizan en todos los sistemas de modelado de inventarios. En general, el desarrollo de un modelado de inventarios requiere un sistema electrónico de modelado, más que simples hojas de cálculo similares a las que se presentan en el Apéndice A. Adicionalmente, para el desarrollo de modelado de inventarios y los datos requeridos, este manual debe ser utilizado en conjunto con las guías para el usuario del modelo de emisiones.

10.0 REFERENCIAS

ARB, 1991a. *Air Resources Board Speciation Manual: Identification of Volatile Organic Compound Species Profiles*, Second Edition. California Air Resources Board, Emission Inventory Branch, Sacramento, California. August.

ARB, 1991b. *Air Resources Board Speciation Manual: Identification of Particulate Matter Species Profiles*, Second Edition. California Air Resources Board, Emission Inventory Branch, Sacramento, California. August.

Beidler, A., J.G. Wilkinson, and R.A. Wayland, 1996, "The Emissions Modeling System (EMS-95) and the Flexible Regional Emissions Data System (FREDS): A Comparison of Emissions Modeling Tools." In: *The Emission Inventory: Key to Planning, Permits, Compliance and Reporting*. Proceedings of a Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, New Orleans, Louisiana, September 4-6, 1996. pp. 807-818.

Benjey, W.G. and N.M. Moghari, 1995. "Functionality of an Integrated Emission Preprocessing System for Air Quality Modeling: The Models-3 Emission Processor." In: *The Emissions Inventory: Programs and Progress*. Proceedings of a Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, Research Triangle Park, North Carolina, October 11-13, 1995. pp. 463-474.

Bruckman, L, 1993. "Overview of the Enhanced Geocoded Emissions Modeling and Projections (Enhanced GEMAP) System." In: *Regional Photochemical Measurement and Modeling Studies. Volume 2*. Proceedings of an International Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, San Diego, California, November 8-12, 1993. pp. 562-578.

Bruckman, L. and W.R. Oliver, 1993. "Development of the Enhanced Geocoded Emissions Modeling and Projections (Enhanced GEMAP) System." In: *The Emission Inventory: Perception and Reality*. Proceedings of an International Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, Pasadena, California, October 18-20, 1993. pp. 810-824.

CFR, 1997. U.S. EPA definition of VOC. 40 *Code of Federal Regulations* (CFR) 51.100(s). Latest amendment: Federal Register, Vol. 62, No. 164. August 25, 1997. pp. 4490-44903.

Dickson, R.J. and W.R. Oliver, 1991. "Emissions Models for Regional Air Quality Studies." *Environmental Science and Technology*, Volume 25, pp. 1533-1535.

Dickson, R.J., V.M. Sadeghi, J.G. Wilkinson, P.K. Brooks, and S.J. Strasser, 1992. "Development of a New Emissions Modeling System." In: *Emission Inventory Issues*. Proceedings of an International Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, Durham, North Carolina, October 19-22, 1992. pp. 511-524.

Dickson, R.J., V.M. Sadeghi, L.J. Markovich, and E.L. Dickson, 1993. "Emissions Modeling Results for the San Joaquin Valley/Auspex Regional Modeling Adaptation Project." In: *Regional Photochemical Measurement and Modeling Studies. Volume 2*. Proceedings of an International Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, San Diego, California, November 8-12, 1993. pp. 506-528.

Dickson, R.J., W.R. Oliver, E.L. Dickson, and V.M. Sadeghi, 1994. "Emissions Inventory Results for Estimating Visual Air Quality in the Golden Circle." In: *Aerosols and Atmospheric Optics: Radiative Balance and Visual Air Quality. Volume A*. Proceedings of an International Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association and American Geophysical Union, Snowbird, Utah, September 26-30, 1994. pp. 603-619.

Hildemann, L.M., G.R. Markowski, and G.R. Cass, 1991. "Chemical Composition of Emissions from Urban Sources of Fine Organic Aerosol." *Environmental Science and Technology*, Volume 25, pp. 744-759.

Janssen, M., 1996 "Modeling the OTAG Inventory: Problems and Solutions to Modeling National Emissions Inventories." In: *The Emission Inventory: Key to Planning, Permits, Compliance and Reporting*. Proceedings of a Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, New Orleans, Louisiana, September 4-6, 1996. pp. 780-787.

Janssen, M., 1998. "Recent Improvements and Enhancement to the EMS-95 Model." In: *Emission Inventory: Living in a Global Environment*. Proceedings of a Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, New Orleans, Louisiana, December 8-10, 1998. pp. 1005-1012.

Koerber, M., 1992. "The Development of a Regional Emissions Inventory for the Lake Michigan Ozone Study," In: *Emission Inventory Issues*. Proceedings of an International Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, Durham, North Carolina, October 19-22, 1992. pp. 525-536.

Mayenkar, K.K., R.J. Dickson, P.K. Brooks, and S.J. Strasser, 1992. "Development of a New Model for Estimating the Release of Biogenic Emissions." In: *Emission Inventory Issues*. Proceedings of an International Specialty Conference sponsored by the Air & Waste Management Association, Durham, North Carolina, October 19-22, 1992. pp. 403-421.

Milligan, R.J., et al., 1997. *Review of NOx Emission Factors for Stationary Combustion Sources*, EPA-450/4-79-021, U.S. Environmental Protection Agency. September.

OMB, 1987. *Standard Industrial Classification Manual – 1987*. Executive Office of the President, Office of Management and Budget, Washington, D.C.

Oliver, W.R., S.L. Heisler, P. Hyde, and F.E. Keene, 1998. "Incorporating Uncertainties into the Emissions Inventory for Phoenix, Arizona." In: *Bridging International Boundaries*. Proceedings of the 91st Annual Meeting and Exhibition of the Air & Waste Management Association, San Diego, California, June 14-18, 1998. CD-ROM, 98-MA5.01.

OMB, 1997. *North American Industry Classification System. United States, 1997*. Executive Office of the President, Office of Management and Budget, Washington, D.C.

Radian, 1993. *Draft GEMAP System Documentation*. Prepared for the Lake Michigan Air Directors Consortium by Radian Corporation, Sacramento, California. May.

Radian, 1995. *Grand Canyon Visibility Transport Commission (GCVTC) Inventory Database*. Prepared for the Emissions Subcommittee of the Grand Canyon Visibility Transport Commission and Project VARED – Electric Power Research Institute by Radian Corporation, Sacramento, California. February.

Radian, 1997. *Development of the Hazardous Air Pollutant Emissions Inventory for Ambos Nogales*. Prepared for the Arizona Department of Environmental Quality by Radian International, Sacramento, California. July.

TNRCC, 1999. Processing Air Pollution Emissions Data. Texas Natural Resources Conservation Commission, Austin, Texas. Dirección de Internet: <http://www.tnrcc.state.tx.us/air/aqp/emissproc.html>

U.S. Census, 1999. North American Industry Classification System. United States Census Bureau, Washington, D.C. Dirección de Internet: <http://www.census.gov/epcd/www/naics.html>.

U.S. EPA, 1995. *Compilation of Air Pollution Emission Factors (AP-42) – Volume I: Stationary Point and Area Sources*, Fifth Edition. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina. January. Dirección de Internet: <http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42.html>.

U.S. EPA, 1998. *Biogenic Emissions Inventory System – Personal Computer Version, Version 2.3*. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Atmospheric Sciences Modeling Division, Research Triangle Park, North Carolina. November 30. Dirección de Internet: <http://www.epa.gov/ttn/chief/software.html#pcbeis>

U.S. EPA, 1999a. Description of Emissions Modeling System. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Atmospheric Sciences Modeling Division, Research Triangle Park, North Carolina. Dirección de Internet: <http://www.epa.gov/asmdnerl/ems95.html>.

U.S. EPA, 1999b. *Emissions Inventory Guidance for Implementation of Ozone and Particulate Matter National Ambient Air Quality Standards [NAAQS] and Regional Haze Regulations*. EPA-454/R-99-006. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina. April. Dirección de Internet: <http://www.epa.gov/ttn/chief/txt/eidocfnl.pdf>.

U.S. EPA, 1999c. *SPECIATE Database*, Version 3.0. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina. October 15. Dirección de Internet: <http://www.epa.gov/ttn/chief/software.html#speciate>.

U.S. EPA, 1999d. *Factor Information Retrieval Data System (FIRE)*, Version 6.22. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina. October 4. Dirección de Internet: <http://www.epa.gov/ttn/chief/fire.html>.

Este Apéndice presenta las hojas de cálculo utilizadas para el ejemplo del modelado de inventarios hipotético contenido en este manual. Las hojas de cálculo para cada una de las seis fuentes de emisión se presentan en el siguiente orden:

- Caldera de la Fábrica – páginas A-1 a A-11
- Proceso de Recubrimiento de la Fábrica – páginas A-12 a A-22
- Vehículos Automotores que Circulan por Carretera – páginas A-23 a A-33
- Gasolineras – páginas A-34 a A-44
- Uso Doméstico de Solventes – páginas A-45 a A-55
- Aplicación de Pesticidas – páginas A-56 a A-66.

A continuación se presenta el formato de cada hoja de cálculo de 11 páginas para cada fuente de emisión:

- Página #1 – Presentación de las emisiones anuales; presentación de los perfiles de distribución temporal mensual, semanal y por hora; cálculo de los perfiles estacionales, los perfiles de actividad semanal y los factores de distribución semanal; y el cálculo de las emisiones estacionales, de día de la semana promedio, sábado promedio y domingo promedio.
- Página #2 – Emisiones Temporalmente Distribuidas
- Página #3 – Emisiones localizadas y distribuidas temporalmente para la Celda A1
- Página #4 – Emisiones localizadas y distribuidas temporalmente para la Celda A2
- Página #5 – Emisiones localizadas y distribuidas temporalmente para la Celda A3
- Página #6 – Emisiones localizadas y distribuidas temporalmente para la Celda B1
- Página #7 – Emisiones localizadas y distribuidas temporalmente para la Celda B2
- Página #8 – Emisiones localizadas y distribuidas temporalmente para la Celda B3
- Página #9 – Emisiones localizadas y distribuidas temporalmente para la Celda C1
- Página #10 – Emisiones localizadas y distribuidas temporalmente para la Celda C2
- Página #11 – Emisiones localizadas y distribuidas temporalmente para la Celda C3.

Este Apéndice presenta los perfiles de especiación de GOTs que podrían ser utilizados por cada una de las seis fuentes de emisión presentadas en este manual. Todos los perfiles de especiación aquí presentados fueron obtenidos de la base de datos SPECIATE de la U.S. EPA (U.S. EPA, 1999c). Cada perfil está etiquetado con el número de perfil de la base de datos SPECIATE. Las cinco columnas para cada perfil identifican el número SPECIATE del compuesto, el número CAS, el nombre de la especie, el peso molecular y el porcentaje en peso para cada compuesto en el perfil de especiación.

Este Apéndice presenta los perfiles de especiación que podrían ser utilizados por las dos de las seis fuentes de emisión presentadas en este manual que podrían tener emisiones de PM (i. e., la caldera de la fábrica y los vehículos automotores que circulan por carretera. Ambos perfiles de especiación fueron obtenidos de la base de datos SPECIATE de la U.S. EPA (U.S. EPA, 1999c). Cada perfil está etiquetado con el número de perfil de la base de datos SPECIATE. Las tres columnas en cada perfil identifican el número CAS, el nombre de la especie, y el porcentaje en peso para cada compuesto en el perfil de especiación. Cabe señalar que en realidad estos perfiles de especiación no fueron utilizados en el manual, y que se presentan sólo con fines informativos.